

恽寿榕 涂侯杰 梁德寿 张汉萍 编著

爆炸力学计算方法

北京理工大学出版社

责任编辑：麻勇武
封面设计：墨　钗



ISBN 7－81013－996－7/TJ・17　定价：18.00 元

爆炸力学计算方法

恽寿榕　涂侯杰　梁德寿　张汉萍　编著

北京理工大学出版社

内 容 简 介

本书系统阐述爆炸力学计算方法的基本原理和知识；重点介绍常用的二维非定常计算程序，包括有限差分法中的欧拉、拉格朗日和任意拉格朗日欧拉程序，以及动力有限元法程序；介绍了最近发展的高分辨率、高精度格式和网格生成技术。本书是主要针对非计算机类专业的和工科类专业的读者写的，内容着重应用，阐述力求简洁。可作为有关专业教材或参考书，也可供有关工程技术人员使用。

图书在版编目(CIP)数据

爆炸力学计算方法/恽寿榕等编。—北京：北京理工大学出版社，1995

ISBN 7-81013-996-7

Ⅰ.爆… Ⅱ.恽… Ⅲ.爆炸力学-计算方法-高等学校-教材 Ⅳ.038

中国版本图书馆 CIP 数据核字(95)第 02285 号

北京理工大学出版社出版发行
(北京市海淀区白石桥路 7 号)
(邮政编码 100081)
各地新华书店经售
蓝地公司激光照排
北京地质印刷厂印刷

*

787×1092 毫米 16 开本 19.5 印张 480 千字
1995 年 6 月第一版 1995 年 6 月第一次印刷
印数：1—1200 册 定价：18.00 元

序

随着电子计算机的出现和它处理能力的不断提高，科学计算越来越受到重视。人们从事科学研究，几百年以来一直采用理论分析和实验这两种手段。从本世纪50年代以后，科学计算已成为科学研究的第三种手段，人们将所研究的问题建立起数学模型，然后在计算机上求解数学方程，从而探索客观世界的规律。这样形成了一批诸如计算物理、计算流体力学、计算生物、计算化学等等新兴交叉学科。不仅如此，在一些工业设计部门，人们也在计算机上调整不同的参数，计算大批的模型，从中挑选出最佳设计方案来。

爆炸力学是一门有广泛应用背景的学科。它的数学模型的核心是一组非线性偏微分方程。这一组方程只有在极特殊的定解条件下，才可以用普通函数的形式将它的解表达出来。过去用理论分析的方法研究爆炸力学问题，主要是根据问题的性质，尽量将方程简化。这样求出来的解，不难理解，其准确性和应用范围都是很有限的。用实验的方法研究爆炸力学问题是普遍采用的手段。但是由于测试仪器的限制，做一次实验能采集到的数据往往也是零散的，很难从中看到整个爆炸过程的全貌。利用电子计算机进行科学计算来研究爆炸力学，可以采用尽可能接近实际的复杂的数学模型，计算结果可以展示整个爆炸过程及其产生的效应，这样有助于理解和掌握爆炸力学中各种过程的机制。这对于推动爆炸力学的发展，对于各种实际爆炸过程的设计都是至关重要的。

本书比较系统地介绍了计算爆炸力学这门新兴学科发展到今天的一些重要成果。本书的内容比较全面，既讲了一维问题的计算方法，又根据实际需要着重讲了二维问题的计算方法；既介绍了差分方法，又介绍了有限元方法；既有比较深入的理论基础知识，又给出了一批典型实际问题的计算结果。作者近年来在计算爆炸力学这一领域中开展了大量的研究工作，并有多年讲授计算爆炸力学这门课程的经验。我期望本书能对从事计算爆炸力学的研究人员、工程技术人员有所帮助。

李德元

1993年10月27日于北京

前　言

本书读者对象是非计算数学专业的从事爆炸力学工作和学习的研究生、教师、科研人员和工程技术人员，重点讲解控制方程组的离散化方法和数值解的基本理论，以双曲型偏微分方程组为主，兼讲抛物型偏微分方程组；以有限差分法为主，兼讲有限元法。本书是主要为工科专业师生编写的，内容偏重应用，在数值解的基本理论部分，着重概念、专用术语和定理的阐述，尽量附有算例，以适合工科毕业学生学习，不追求理论上的严格推导。着重介绍爆炸力学典型离散格式，对格式的控制方程组和离散化方案有较详细的讲述，对格式的优缺点和应用范围也有讨论，目的是使读者对各典型格式有较全面的了解，以便选择和使用。为了反映近代成果，本书专有一章介绍有限差分法的最新进展；有限元法中讲述的 DEFEL 程序和 DYNA 程序都是最近发展起来，并且正在广泛应用的程序；还介绍了材料动态断裂的最近数值模拟成果。

计算爆炸力学这一学科尚处于初步形成阶段，本书仅涉及其中一部分内容。在离散化方法中仅介绍有限差分法和有限元法两种，因为这两种方法应用最普遍。对于一个比较成熟的程序，当使用它来模拟计算某一具体问题时，常常需要作修改和调整，何况所得到的程序，由于种种原因，经常有各种错误和遗漏，以致无法使用。本书的目的之一就是有助于读者去消化这些程序，纠错并调通这些程序，改进和发展这些程序，使之为爆炸力学课题服务。

本书是在"爆炸力学计算方法"研究生课讲授八年的基础上写成的。初稿以李德元教授在长沙国防科技大学 1981 年的讲课内容为基础，经过不断补充和发展，至今成书。全书 6 章：第 1 章绪论；第 2 章讲较简单的抛物型方程的差分解法，介绍稳定性、收敛性和相容性等基本概念，补充了一些数学知识，为学习下一章作准备；第 3 章讲较复杂的双曲型方程的差分解法，讲解了弱解问题、耗散性和色散性问题，使读者对离散化的基本概念和基本方法有一个全面的认识；第 4 章讲典型有限差分方法，选择了欧拉型、拉格朗日型和任意拉格朗日——欧拉型等三类程序，它们都是国内外广泛应用的程序，是本书的重点内容；第 5 章讲动力有限元法，为了便于学习，从结构有限元讲起，介绍了当前广泛应用的二个动力有限元程序。由于动力有限元法在爆炸力学中应用呈迅速发展趋势，本章内容有助于读者了解和掌握其基本原理；第 6 章讲有限差分法的最近发展，内容是高分辨高阶精度格式和网格生成技术；反映了当前的主要发展方向和成果。

本书第 1、3 和 4 章由恽寿榕编写，第 2 章由张汉萍和恽寿榕编写，第 5 章由梁德寿、王中东和丁刚毅编写，第 6 章由涂侯杰编写，全书由恽寿榕和张汉萍负责校订。

本教材是在李德元教授 1981 年长沙讲课内容的基础上编写的，在编写过程中不断得到他的指导，在此完稿之时，对李德元教授表示衷心的感谢。

恽寿榕

1993 年 9 月　北京

目 录

第一章 绪 论

爆炸是指在极短时间内，在极小的体积内或面积上发生极大能量转化的过程，也可以说是发生高功率密度（单位体积或单位面积）的过程。其转换的能量可以是核能、化学能和物理能，爆炸过程伴随有物理变化、化学变化和核变化。爆炸力学主要以力学的观点和方法研究爆炸过程。研究爆炸力学可以从理论研究、实验研究和数值模拟研究三个方面进行。本书介绍数值模拟研究爆炸力学的基本原理和方法。

爆炸力学所研究的过程中，伴随有各种参量（速度、压力、应力和温度等）随空间和时间的急剧变化。通常，速度超过材料音速，压力为1GPa到数百GPa，核爆炸的压力更高。这些过程通常用流体动力学和弹塑性动力学模型来描述，根据情况采用一维或多维空间，加上化学反应方程、反应率方程、热传导方程、本构关系等，成为包含有线性和非线性偏微分方程、常微分方程、积分方程、泛函方程及代数方程的一个封闭方程组，根据具体情况有不同的初始条件和边界条件。

以往在极其简化的情况下，得到了一些解析解，这些解法非常巧妙，起了很大的作用，但是，一般只限于包含两个自变量的平面问题。随着科学与生产的发展，解析解已经远远不符合要求了，人们把注意力转向数值解，因为数值解对控制方程的限制宽得多，可以得到更接近实际情况的解。

早在1910年，英国人Richardson就提出了用数值方法解流体力学问题。1928年Courant、Friedrichs和Lewy提出了双曲型差分方程的收敛性必要条件（这个条件至今仍在应用），当时主要由于计算工具落后，使得数值计算工作难以进行。

第二次世界大战期间，美国加速研制核武器，需要进行大量数值计算，因而促进了计算机的诞生和发展。1944年世界上第一台自动序列受控计算机（Mark.1）问世，它的主要部件是继电器，每秒进行3次加法。1946年世界上第一台电子计算机ENIAC制成，使用了18000个电子管、1500个继电器，全重300吨，占地1800平方英尺，每秒能运算5000次；1959年出现了使用晶体管的第二代计算机；1965年出现了中小规模集成电路的第三代计算机；1970年出现了大规模和超大规模集成电路的第四代计算机；现在正在研制第五代计算机。计算机不仅在军事各个领域得到广泛应用，而且遍及到了国民经济各个领域及生活领域。计算机发展得很快，每隔五至八年，运算速度提高10倍、体积缩小10倍、成本降低10倍，现在一台个人微型计算机的性能相当于十余年前的大型计算机。计算机的迅猛发展促使数值计算飞速发展起来。

60年代以来，以美国原子能委员会洛斯阿拉莫斯实验室为代表，进行了大量的爆炸力学数值计算工作，采用二维不定常流体和流体弹塑性模型编制了许多实用程序，对许多过去无法计算的复杂问题进行了成功的计算。现在已经不仅是对某一类问题的计算机数值模拟，还发展到可以在计算机上进行数值试验，得到了用仪器设备实验尚未得到的新结果，而且也可以在计算机上进行产品的设计工作。与此同时，在数学模型研究和离散化方法的研究方面也取得了长足的进展，逐步形成了数值计算的完整理论。过去利用解析方法求解数学问题得到的解析解和近似解的应用范围极为有限，现在由于数值计算的巨大运算能力和适应能力，使得科学计算不再是一种辅助手段。为了认识某一种科学技术规律，人们可以从理论研究、实验研究和数值计

算研究这三类基本科学活动进行探索. 以往对一个数学问题,总是在先对问题的提法、解的性质、近似方法与误差分析等方面进行详细的研究后,才对该问题求解;现在由于电子计算机和数值计算方法的巨大解题能力,可以对一些提法还不太清楚、解的特性还不太了解的问题求解. 。进一步说,数值计算还能发现新的科学现象,混沌的发现就是一例。混沌是六十年代的重大科学发现之一,它解决了确定性系统中为什么会出现非确定性的问题,令人意外的是通过大量的数值计算得到这一重大发现的,而不是通常那样通过理论分析或实验发现的。由上可见,数值计算已经成为一门独立的研究手段,出现了计算力学、计算物理、计算化学、计算生物学等一系列学科,也出现了计算爆炸力学这一学科。

计算爆炸力学就是以计算机为工具,来探索爆炸力学的规律,加工力学数据(特别是实验数据),解决爆炸力学问题的。计算爆炸力学是应用性很强的学科。图 1-1 是侵彻问题研究的流程框图,适用于弹和靶的设计研制。从图中可以看出,三种研究手段的紧密交错配合关系,也可以看出计算爆炸力学的重要性。

对于大多数从事爆炸理论及应用方面工作的人员来说,常常没有经过计算力学的专门学习和训练。为了能够与计算力学专业人员紧密合作,以完成任务,有必要掌握计算力学的基本知识;如果他们想亲自进行数值计算,则应更深入地掌握计算力学。

爆炸力学研究的课题很广泛,应用在常规武器、工程爆破、爆炸加工、动高压合成新材料和爆炸灾害的防护等方面。这些应用从理论上可以归纳为以下几个课题:

1. 炸药在各种形式初始冲能作用下的起爆;
2. 爆轰的传播与控制;
3. 爆轰产物的运动;
4. 爆炸对薄层介质的驱动加速;
5. 爆炸加载下,应力波的传播及材料的破坏;
6. 空气中爆炸;
7. 岩石及土中爆炸;
8. 水中爆炸;
9. 高速碰撞,弹丸、长杆及射流对目标的侵彻;
10. 爆炸加载下材料的化学反应及相变。

上述理论课题原则上可以用双曲型偏微分方程组来描述,大部分属于三维和二维不定常问题。它们比通常的流体力学问题、空气动力学问题及结构动力学问题要复杂得多,因为有许多特殊要求。例如:

1. 材料的大变形;
2. 计算目标区域内有多种材料,并且要求清晰显示内界面和外界面;
3. 化学反应;
4. 高压、高温及高应变率使得一些材料系数不能视为常数;
5. 各种强间断的处理;
6. 由于材料破坏或相变产生新的界面;
7. 滑动边界的处理。

上述特殊要求使得数值模拟难度加大,程序复杂。针对各类课题,编制了众多的程序,它们的专用性较强,各有优缺点,迄今尚没有一个公认的完善程序,也没有一个普适的通用程序,面

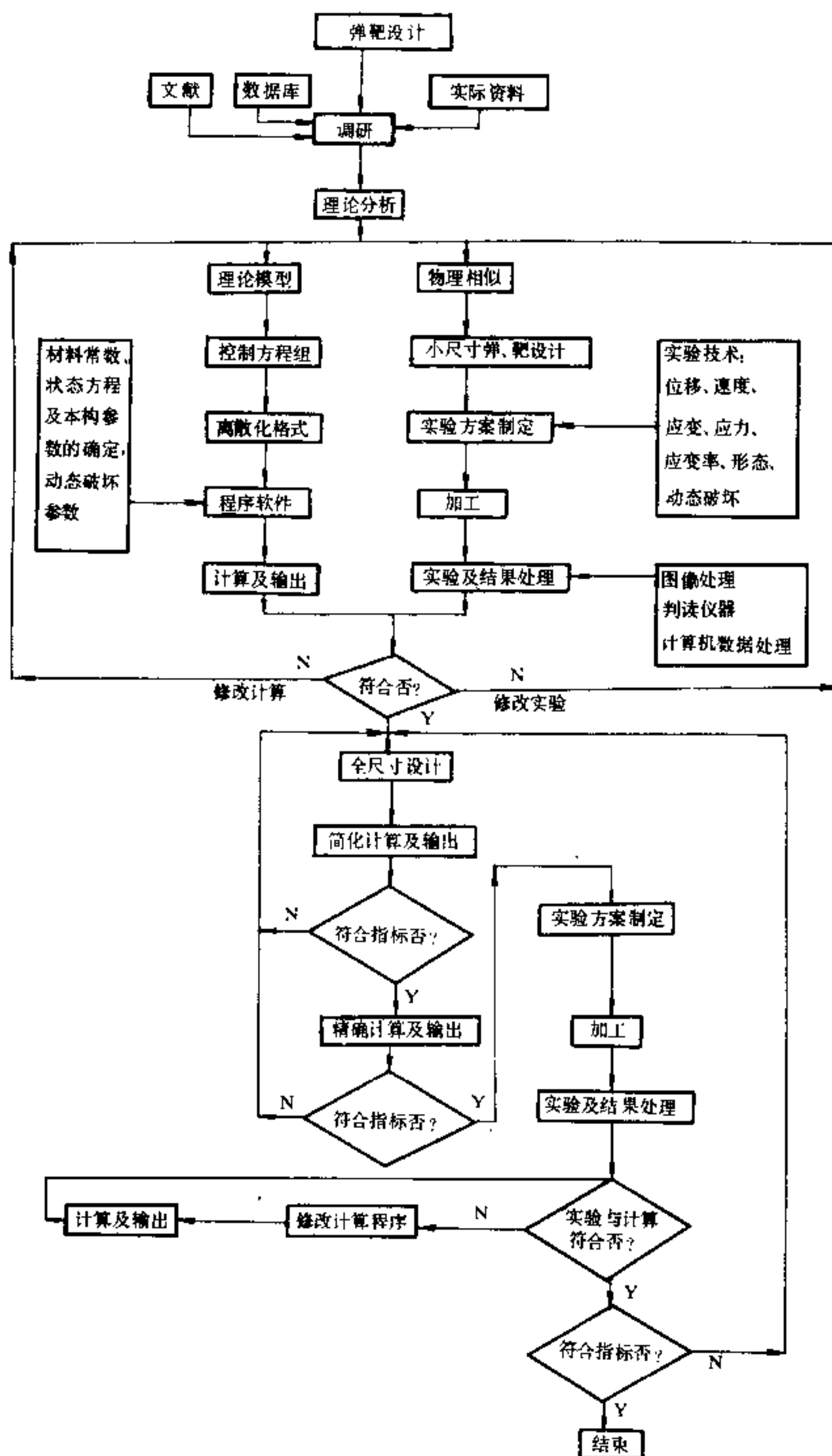


图 1-1　侵彻研究框图

是在不断完善和不断发展之中。

为了进行数值计算，要把连续的微分方程组离散化，成为求出有限个点的解的离散方程组

(通常是代数方程组),然后用计算机求解。最常用的离散化方法有两类:一类是先建立微分方程组(控制方程),然后用网格覆盖时间和空间,进行近似的数值解。这类方法以有限差分法为代表。另一类是先将连续的目标空间分解成有限个小单元,组成离散化模型,然后对离散化模型求近似的数值解。这类方法以有限元法为代表。有限差分法在动力学、流体力学和爆炸力学中得到广泛应用,本书以此为主要内容。有限元法在静力学、结构力学和低速的动力学中得到广泛应用,最近推广到动力学范围。一些有限元程序应用在高速碰撞和爆炸驱动等问题的计算中,有很好的发展前景。

在有限差分方法中,按照采用的坐标分为拉格朗日(Lagrange)法(简称拉氏法)和欧拉(Euler)法两种。拉格朗日坐标是跟随材料质团运动的,质量自动守恒,能够清晰地显示解域内部多种物质的界面和自由界面,能比欧拉法提供更多的信息。在一维计算中,质团都是有序的,不会产生网格扭曲,因此都用拉氏法。早期有名的 Von Neumann-Richtmyer 方法就是拉氏法(1950);一维流体弹塑性程序 KO Code(Wilkins,1969)及一维流体弹塑性、化学反应、层裂及相变程序 SIN-A(C. L. Mader,W. R. Gage,1967)也是使用拉氏坐标。由于拉氏法的一系列优点,使得在二维程序研究的初期,人们也使用拉氏坐标。Kolsky 在 1955 年给出了第一个拉氏二维程序。但是,二维拉氏程序不能计算材料大变形问题,因为当材料大变形时,拉氏网格发生扭曲,使计算精度下降,使计算时间步长变小(对于显式格式)。更有甚者,网格边由于严重扭曲,产生相交,出现负质量,会使计算终止。为了克服这个缺点,人们采取了各种措施:Grandey 在 1961 年提出使用三角网格,当格点向对边靠近时,意味着网格边快要相交,同时网格体积变小了,使得压力和人工粘性项加大,把格点"顶"开,从而阻止了网格边的相交;Wilkins(1964,1969)等提出用新的人工粘性项来阻止网格畸变;Crowley(1970)则用可变邻域方法(自由拉氏法)代替传统的固定邻域方法。这些措施都能不同程度地推迟网格相交,但是这些措施所附加给网格的"粘性"或"硬度"可能歪曲了流场的本来面目,使得计算结果偏离实际的力学过程。人们经常采用的另一种方法是及时地重分网格,就是 Browne 在 1966 年提出的。当网格产生较明显的扭曲时,按照网格边尽量正交和网格大小尽量均匀的原则,重新划分网格,由旧网格对新网格进行质量、动量和能量输运计算,而得新网格的参量,然后继续进行计算。从原则上来说,这是根本解决网格扭曲的办法,但是由于引进了输运项,也就是说引进了欧拉方法,经过多次重分后,不能再视为跟踪质团计算了,因为计算结束时刻的流场质团,已经无法和初始时刻的质团一一对应。再者,重分网格并不是很容易实现的,目前还在相当程度上依赖于经验和技巧,人们致力于编制自动重分网格程序,但至今还没有得到满意的结果。

在爆炸力学课题中经常遇到接触间断,例如爆炸驱动金属壳体,在内界面上压力和法向速度连续,但是密度和切向速度间断;在同种材料内部,如果产生冲击波的相互作用,在斜冲击波和马赫波阵面,也会出现接触间断。在计算方法中,通常将接触间断的计算称为滑移面计算。目前常用拉氏法求解,其基本步骤是,将内界面两侧材料分为主面(一般为密度较大的材料)和从面(密度较小的材料),第一步,从面材料先在不动的刚性主面上滑移运动;第二步,由主从面相互作用关系确定主面材料位置;第三步,最后确定从面材料位置。典型的滑移面计算见 HEMP 程序(Wilkins,1969),Seaman(1983)作进一步改进,能处理计算过程中新出现的滑移面,在预先估计到会出现滑移的位置埋设滑移面,在一定条件下生效。在动力有限元程序 DYNA 中,对滑移面的处理更为详细,可以按照四种类型处理。但是总的说来,滑移面的计算是在实验结果和计算结果相近的基础上予以承认的,还没有足够的数学理论基础。

弹塑性计算需要不断跟踪材料质点，因此用拉氏坐标明显优于欧拉坐标。通常在计算中把变形分为体积变形和剪切变形，相就地将应力分为静水压强和偏应力，而塑性变形仅与偏应力有关；将应变张量分解成弹性应变张量和塑性应变张量两部分，塑性变形用 Von Mises 屈服准则和 Prandtl-Reuss 增量理论描述。材料的状态方程各不相同，对于金属，亚声速时常用 Mie-Gruneisen 状态方程，在超声速时常用 Tillotson 状态方程。在国外，大多数重要金属的各种状态方程的数据，可以在有关资料中找到，在数 GPa 压力范围内已能满足大多数计算要求。在国内，这方面工作刚开始，对于缺乏的国内材料参数，不得不以国外相近材料的参数代替。

拉氏法由于上述一系列优点，成功地计算了许多课题。常用的程序有 TENSOR、HEMP 和 TOODY 等，特别适于要求清晰显示界面而变形不太大的情况。对于材料严重扭曲变形的情况，拉氏法就很难计算，甚至无法进行，而需要用欧拉法进行计算。

典型的欧拉法以流体网格法(FLIC)为代表，用"和"分裂差分格式，每一个时间步长内分两步进行：第一步仅考虑压力效应，相当于拉格朗日计算；第二步仅考虑输运效应，相当于将畸变的拉格朗日网格重新回到原来的坐标位置。就是说，如果拉氏法的每一计算步都进行重分网格，使之回到原来的网格，这就成为欧拉法了。

FLIC 法对于单物质的流场计算简单方便，不受大变形限制，显示了欧拉法的优越性，但是有两个重大缺点，即不能清晰显示界面和不容易处理多物质问题。为了显示界而，采取了示踪点的方法，Harlow 和 Welch 提出了标记网格法 MAC(1965)，在欧拉网格内设置无质量标记点(Marker)，它们不参与守恒运算，跟随流场运动，从而达到跟踪和显示流场位置的目的。Hageman 和 Walsh 提出的 HELP(1971)充分发展了这个方法，他们在材料的内界而和自由界面设置了标记点，一种材料设置一种，标记点连线走向的左侧为该标记点所代表的材料，连线成为材料的界面，连线通过的内网格就是混合网格。根据分割网格边的部分面积进行混合网格的输运计算，HELP 程序可以允许两种以上材料，材料内界面可以多次和一个网格边相交，标记点的数量可以自动增密或减少。HELP 程序应用很广，但是程序复杂，计算时间长。

质点网格法(PIC)采用了有质量的质点(Particle)，Harlow(1964)和 Amsden(1966)对 PIC 方法做了较全面的总结。PIC 方法的主要特点是在初始时刻将网格的质量、动量和能量凝聚在有限个点上，例如 16 个质点，每个质点均分得网格的十六分之一的质量、动量和能量。每一个计算时间步仍分两步进行，第一步为拉氏步，按网格的参量计算压力效应，得到新的参量，包括网格速度；第二步为输运计算，不再使用差分方程，而是按照质点所在的位置，找出相邻的四个网格速度，按照面积加权计算来得到质点速度，并计算本时间步的位移，以确定质点的新坐标。如果离开了原来网格，则带走了相应的一份质量、动量和能量。计算所有质点的运动，其总和就是各个网格的输运效应计算。使用不同的符号表示不同材料的质点，于是 PIC 方法既保留了欧拉法适于大变形的优点，又能计算多种材料和显示内外边界，因此 PIC 是一个适应性很强的程序，其缺点是要求计算机的内存大，运行机时长。Harlow 和 Amsden 在 1974 年提出 GILA 程序，他们在两种材料的内界面的两侧的几排网格采用不带固定质量的有质量示踪点，进行离散输运，在计算过程中可根据需要丢掉或加进示踪点，其余网格则采用 FLIC 方法进行连续输运，从而大大节省了内存和机时，同时基本保持了 PIC 程序的优点。

对于多种材料问题，混合网格是欧拉法所特有的困难问题。拉氏法由于网格跟随物质运动，可以避免混合网格。欧拉法则由于网格固定，不可避免出现混合网格。混合网格内各组分的参量要分别计算出来，因此比纯格的计算量要大一倍以上。通常假定混合网格内各组分速度

一样，压力一样，由各组分的状态方程以及内能按体积分数分配的原则求出密度和内能。混合网格的输运是一个很复杂的问题，前面谈到PIC程序的离散输运相当简单，HELP程序的连续输运就太复杂了。Kershner和Mader1972年提出的2DE程序及徐国荣等1980年提出的多流体网格法简化了输运计算。他们不用示踪点，认为混合网格本身就显示了内界面的位置，混合网格只要确定两种材料的各个参量就行了，不必求出材料的具体界面位置。为了实现混合网格的连续输运，他们巧妙地将输运归纳为几种最可能的模式，按照一定的规则选用其中一种模式输运。他们的程序比HELP简单得多，当然内界面的显示不及HELP清晰。

欧拉法不能跟踪质点运动，因此计算弹塑性效应不如拉氏法精确。HELP程序将弹塑性计算作为“和”分裂格式中的一个单独计算步，为了计算K格的弹塑性效应，先求出n+1时刻K格心在n时刻的坐标，找出相邻四个网格，由该四个网格在n时刻的应变率按面积加权法则求出该点的应变率，作为K格n+1时刻的应变率，用同样方法求得应力偏量，然后计算其它量。欧拉法计算滑移面遇到了困难，方法不够成熟，精度较差。

鉴于欧拉法和拉氏法各有优缺点，虽然在拉氏法中引进了欧拉计算(重分网格)，在欧拉法中引进了拉氏计算(示踪点)，但是对许多课题仍然不够理想，于是人们发展了欧拉和拉氏的混合程序。一种方法是划分解的区域，一部分区域用拉氏程序，另一部分区域则用欧拉程序。例如自锻成型破片战斗部的计算，可将自锻破片部分用拉氏网格，爆轰产物用欧拉网格，此类程序有Noh的CEL程序(1964)；Hirt、Amsden和Cook提出了另一种方法，即任意拉氏欧拉法(ALE方法，1974)，他们使用网格速度D，当D为零时，相当于欧拉法，当D为质点速度时，相当拉氏法，当D按某种要求取值时，相当于拉氏法进行了重分网格。改变D值可以使程序适应各种课题的要求，也可以在计算过程中根据需要改变D值。

有限差分方法要求连续条件，因此不适于强间断情况。为了使差分计算能够顺利通过强间断面，需要有格式粘性，必要时要加上人工粘性项，使得间断面在几个网格内快速连续变化，形成“几乎间断”，使得差分计算能顺利进行，而又能保持强间断面的参量基本不变(仅仅使间断面变宽)。人工粘性首先由Von Neumann和Richtmer(1950年)提出，后来发展了多种形式，至今仍是解决强间断数值计算的主要方法。人工粘性项的加入，会产生激波抹平和激波区拉宽的现象，还可能在激波两侧发生解的伪振荡，为此提出了各种高分辨率、高阶精度格式。一类是对差分格式的耗散项和色散效应进行调节和控制，抑制伪振荡，如Boris和D. L. Book(1973年)提出的通量修正输运法(FCT，Flux Corrected Transport)和A. Harten(1983)提出的总变差递减法(TVD，Total Variation Diminishing)；另一类是Годунов(1959年)提出的间断分解法，对间断面区分为五种可能情况，用精确的解析解来处理，可以得到很陡的冲击波阵面。

采用调整网格尺寸的办法，也可以提高冲击波的分辨率，提高计算精度，即对于物理量变化大的区域采用细网格，对于物理量变化小的区域采用粗网格，而且在计算过程中自动调整，这就是最近发展起来的自适应网格法，它能够在保持计算网格总数变化不大的条件下，提高计算精度。

边界条件的处理，特别对于复杂边界计算域，是数值计算的一个关键问题。传统的有限差分法采用笛卡尔坐标系，采用两簇线覆盖计算域，对于复杂边界很难精确拟合，因而其计算精度一般低于内网格的计算。近年来发展了各种网格生成技术，对于物理面采用贴体坐标系(Body-fitted Coordinate System)，通过坐标变换，把不规则的物理求解域变为规则的计算域，把曲边界变换为直边界，使数值计算方便而准确。网格生成技术使有限差分方法能够应用于复

杂边界课题的计算。

由于有限元法在结构力学计算中得到了极为广泛和成功的应用，人们自然会想到将其应用于动力学计算。在动力学问题中，绝大多数情况存在塑性变形，应力和应变不再一一对应，不再能通过总刚度矩阵求解，节点集中力是根据静力平衡原则计算的，没有用变分。对于非定常问题中的时间步长计算，采用有限差分方法，这与原来的有限元法（称为结构有限元法）已有本质的不同，称为动力有限元法。它已经引进了一些有限差分方法，但是和有限差分法有很大的不同。在动力有限元法中（以后简称有限元法），运动方程是通过单元的节点力列出的，同邻近的网格的形状无关。在有限差分法中，运动方程是由邻近网格的压力差来计算的，对于不规则边界或区域，需要分别建立差分方程或作专门处理，有限元法则没有这种麻烦。有限元网格编号法比有限差分法中的 ij 编号麻烦些，但是适合于形状复杂的计算域，适合于网格形状和尺寸变化大的情况，更便于网格重分。有限元法的另一个优点是便于编制通用程序。基于上述优点，有限元法在爆炸力学数值模拟中得到愈来愈广泛的应用，典型的程序有 EPIC、DEFEL 和 DYNA 等，成功地应用于高速碰撞、侵彻、爆炸驱动和爆炸成型弹丸等计算，效果良好。

目前二维程序已经进入成熟阶段，成为科学研究和产品研制的有力科学工具。但是爆炸力学中存在许多属于三维空间的课题，难以用二维模型来描述。例如对装甲的侵彻问题，它直接关系到弹丸设计和防护装甲设计，二维模型只能计算垂直侵彻问题，而事实上绝大多数情况下是斜侵彻，属于三维模型。用二维程序计算平面斜侵彻的结果仅在初始的很短时间内给出定性（有时是定量的）数据，以后则和实际差别愈来愈大。当然，不是说没有改善和缩小这种差别的技术措施，但是用三维模型才是根本改善措施。现在尽管出现了速度为每秒数亿次的计算机（如 CDC7600，CRAY），但是三维计算，仍然是十分昂贵的，仅仅对于个别重大课题，在具有较为雄厚财力的部门才能采用。当然，随着计算机硬件的迅猛发展，三维计算将很快得到普遍应用。现在的三维程序都是在原来二维程序的基础上发展起来的，例如 Wilkins 等的 HEMP3D（1975）是在二维有限差分拉氏程序 HEMP 基础上发展的；Johnson 等则发展了 EPIC-3（1978），采用四面体有限元，它能有效地防止网格扭曲交叉，因此能够计算变形相当大的情况，在高速斜碰撞计算中，已经获得了与实验十分一致的结果。随着计算机功能的迅速提高，计算费用大幅度降低，使得三维计算愈来愈有现实性，现在已经可以通过实验研究、材料动态特性描述和三维计算的密切配合，来解决过去难以解决的课题了。

由于数值解的长足发展，使得解题能力有了质的飞跃，在这种情况下，解析分析的作用并不是无足轻重了。庄逢甘和张涵信针对空气动力学的数值计算[2]指出，面对数值计算结果输出的数据“海洋”，如何判别给出的流动现象是物理的还是非物理的？如何适应物理问题而改进现有计算方法的不足？对此就需要应用解析分析了。特别是气动方程的非线性，在有些情况下存在分叉、突变和混沌等非线性行为，借助于解析分析，就更有必要了。他们的这个观点对于爆炸力学数值计算也是适用的。

由于数值计算的蓬勃发展，又由于计算机硬件的突飞猛进，出现了一个矛盾，这就是如何分析和研究计算过程中所产生的浩如烟海的数值结果。李德元和金其杰指出[3]，单靠人脑处理数据已经远远不够了，出路看来得借助计算机的图形处理能力，就是说用图形输出代替数字输出，实现计算结果的可视化。因为高分辨率彩色图形显示器可以在一幅画面上浓缩几百万个数据，一目了然，如果用数字输出，则每百万个数据需要 2000 张纸，处理分析起来显然困难多了。可视化不仅在计算结果分析方面有用，在计算的各个步骤都有用，可以通过直观的图形表示加

快、检查与改善计算过程。可视化的进一步发展是将数据及数值分析与计算机图形学集成为一门新技术，称为图象化技术(Visualization)，也称为图象数据分析(Visual Data Analysis 或 VDA)[4]。对于力学问题，以假设的形式给出控制方程组，由此收集和计算得到大量数据和信息；通过 VDA 可以迅速进行模型和趋势的搜寻，从而修改假设，得到更符合实际的控制方程组，并以更形象、更突出的方式显示结果，大大提高了数值计算的质量和速度。VDA 和多媒体技术相结合，形成了集视、听为一体的极具临场感的“虚拟实境(Virtual Reality)”技术，可以在计算机上进行声貌并茂的复杂爆炸过程的动态逼真演示，这显然能够促进爆炸力学的发展。

对于爆炸力学课题，经过理论分析后，首先是建立数学模型，确定描述该过程的物理量，确定它们之间的函数关系。数学模型可以是连续的、离散的或统计的表达形式，归纳成一个复杂的控制方程组。一般说来，问题具有三重非线性：即材料大变形产生的几何非线性，材料动态本构关系的非线性以及界面上发生滑动、摩擦和分离等的界面非线性。为了能够计算，还要查阅资料或通过实验确定方程组中的物理常数。

下一步工作是数值方法研究。将控制方程组离散成离散方程组，研究离散方程组的相容性、稳定性和精度，研究爆炸力学特殊问题(如强间断、大变形、滑动边界和动态损伤等)的处理。编制源程序时，应考虑通用性和可更改性，使得程序能够方便地计算某一类问题，并且要考虑到非专业计算人员能够较快地掌握使用。编制源程序时，不仅注意基本运算部分，也要注意输入和输出部分的编制，现代大型程序中，输入输出部分的指令数与基本运算部分相当，有的甚至超过。

源程序必须经过考核才能实际使用，考核的方法是将计算结果和实验结果或解析解作比较，应具有足够的精度，至少也应当和成熟的程序计算结果作对比。源程序经过考核后，就可以对该爆炸力学过程进行计算机实验或数值模拟。在计算机模拟的基础上，应用控制论、优化设计方法和计算几何等理论，运用绘图软件就可以进行计算机辅助设计；应用 VDA 技术和“虚拟实境”技术，可以对爆炸力学进行更高级的研究。

计算科学的发展和硬件的发展是分不开的，随着大型计算机的发展，个人微机(PC 机)以更快的速度发展，使得计算技术的普及和推广有了坚实的基础。近 10 年来，大型机的计算速度以平均每年 20%的速率提高，而 PC 机为 52%；大型机每 MIPS(每秒执行的百万条指令数)成本每年下降 11%，而 PC 机下降 27%，现在 PC 机每 MIPS 成本仅为大型机的 1/50，因此 PC 机发展的前途广阔；功能齐全的工作站也得到了广泛的应用，因此，在 PC 机和工作站上开展数值计算研究已经成为热门课题。

总之，计算数值研究已成为爆炸力学研究的三个基本手段之一，计算方法的基本原理也应成为爆炸力学科技工作者的必备知识之一。

参 考 资 料

[1] 李德元,徐国荣,水鸿寿,何高玉,陈光南,袁国兴. 二维非定常流体力学数值方法。北京:科学出版社,1987.

[2] 庄逢甘,张涵信. 数值模拟与解析分析,第六届全国计算流体力学会议论文集. 北京:科学出版社,1992,PP1—11.

[3] 李德元,金其杰. 计算流体力学的可视化问题,第六届全国计算流体力学会议论文集. 北京:科学出版社,1992,PP24—29.

[4] 郑友律. 当代信息产品的图象化。计算机世界,1974 年 7 月 20 日.

第二章 抛物型方程的差分解法

抛物型方程是连续介质力学问题中常见的偏微分方程之一。例如热传导方程、气体扩散方程、粘性流体的运动方程都可以归结为抛物型方程。从物理学讲，含有时间 t 的抛物型方程所描述的物理现象，常常是和某种不可逆的耗散过程相关联的。本章介绍差分解法的一般知识，并补充一些必要的预备知识，介绍抛物型方程的差分格式以及构造差分格式的方法，对于这些格式的相容性、稳定性和收敛性进行分析。由于非线性方程的定性分析(稳定性、收敛性等)直到目前为止尚没有一套完整的理论，对于它们通常是利用各种方法做线性化处理后进行近似的讨论。所以这方面的工作主要是对线性偏微分方程进行的。

§2.1 定解问题的离散

对于一个定解问题的离散化，包括三个方面：求解区域，控制方程和初边值问题的离散。下面以一维热传导方程为例进行讨论。

$$Lu = 0 \qquad 0 < x < 1, 0 < t \leqslant T \tag{2-1-1}$$

式中

$$L = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

为微分算子，T 为计算时间的终值。上式的边界条件有第一、第二和第三类边界条件。

为了将求解区域离散，用二簇平行线覆盖求解域。在 x-t 平面上，取 $h=\Delta x$ 和 $\tau=\Delta t$ 分别为函数 $u(x,t)$ 的自变量 x 和 t 的改变量，由 $x_j=jh, t_n=n\tau(j=0,\pm1,\pm2,\cdots;n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$ 两组平行线构成的矩形网格覆盖整个 x-t 平面。h 称为 x 方向的空间步长，τ 称为 t 方向的时间步长，网格线的交点称为网格的结点。

对初值问题网格划分为

$$t_n = n\tau; \quad n=0,1,\cdots, \quad m_0; \quad m_0=\left[\frac{T}{\tau}\right];$$

$$x_j = jh; \quad j=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

其中 m_0 是 T/τ 的最大整数部分，即

$$m_0\tau \leqslant T < (m_0+1)\tau$$

在 $t=0$ 上的结点称为边界结点，其余所有属于 $\{-\infty<x<+\infty, 0<t\leqslant T\}$ 内的结点称为内部结点。

对于边值问题而言，网格划分为

$$t_n = n\tau, \quad n=0,1,\cdots, \quad m_0; \quad m_0=\left[\frac{T}{\tau}\right]$$

$$x_j = jh, \quad j=0,1,\cdots, \quad N; Nh=1$$

在 $t=0, x=0, x=1$ 上的结点称为边界结点，其余所有属于 $\{0<x<1, 0<t\leqslant T\}$ 内的结点称为内部结点。

以后还经常用到半网格点上的值

$$t_{n+1/2} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\tau, \quad n = 0,1,\cdots, \quad m_0 - 1$$

$$x_{j+1/2} = \left(j + \frac{1}{2}\right)h, \quad j = 0,1,\cdots, \quad N - 1$$

差分方法就是在偏微分方程中用差商代替微商得到相应的差分方程，通过求解差分方程得到微分方程的近似解。

以后为了方便起见，将网格点(x_j,t_n)简记为(j,n)。点(j,n)上的函数值$u(x_j,t_n)$简记为$u(j,n)$。

下面对控制方程(2-1-1)式进行离散。

用泰勒级数将函数$u(x,t)$在(j,n)点展开

$$u(j,n+1) = u(j,n) + \tau\frac{\partial u(j,n)}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2\,!}\frac{\partial^2 u(j,n)}{\partial t^2} + \frac{\tau^3}{3\,!}\frac{\partial^3 u(j,n)}{\partial t^3} + \cdots \tag{2-1-2}$$

$$u(j,n-1) = u(j,n) - \tau\frac{\partial u(j,n)}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2\,!}\frac{\partial u(j,n)}{\partial t^2} - \frac{\tau^3}{3\,!}\frac{\partial^3 u(j,n)}{\partial t^3} + \cdots \tag{2-1-3}$$

由(2-1-2)式可得

$$\frac{\partial u(j,n)}{\partial t} = \frac{u(j,n+1) - u(j,n)}{\tau} - \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(j,n) - \cdots \tag{2-1-4}$$

由(2-1-3)式可得

$$\frac{\partial u(j,n)}{\partial t} = \frac{u(j,n) - u(j,n-1)}{\tau} + \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(j,n) + \cdots \tag{2-1-5}$$

由(2-1-2)式+(2-1-3)式可得到

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(j,n) = \frac{u(j,n+1) - 2u(j,n) + u(j,n-1)}{\tau^2} + \frac{2\tau^2}{4!}\frac{\partial^4}{\partial t^4}u(j,n) + \cdots \tag{2-1-6}$$

同理，对x进行泰勒展开有

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(j,n) = \frac{u(j+1,n) - 2u(j,n) + u(j-1,n)}{h^2} + \frac{2h^2}{4!}\frac{\partial^4}{\partial x^4}u(j,n) + \cdots \tag{2-1-7}$$

(2-1-4)式右端项的第一项是$u(x,t)$关于自变量t的向前差商，(2-1-5)式是u关于t的向后差商。(2-1-6)式和(2-1-7)式分别是u关于t和x的二阶中心差商。

为了书写方便，引进以下符号来表示u关于x,t的差商。

一阶向前差商 $\quad \Delta_h u_j^n = \dfrac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h}$

$$\Delta_\tau u_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau}$$

一阶向后差商 $\quad \nabla_h u_j^n = \dfrac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h}$

$$\nabla_\tau u_j^n = \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\tau}$$

一阶中心差商 $$\delta_h u_j^n = \frac{u_{j+\frac{1}{2}}^n - u_{j-\frac{1}{2}}^n}{h}$$

$$\delta_{2h} u_j^n = \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h}$$

二阶中心差商 $$\delta_h^2 u_j^n = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h_2}$$

$$\delta_{2h}^2 u_j^n = \frac{u_{j+2}^n - 2u_j^n + u_{j-2}^n}{4h^2}$$

以上 $u_{j+\frac{1}{2}}^n$、$u_j^{n+\frac{1}{2}}$ 分别是半点 $\left(j+\frac{1}{2},n\right)$、$\left(j,n+\frac{1}{2}\right)$ 上的值。

利用以上公式，用不同的差商来代替方程中的导数，就可以得到一系列的差分格式。

格式 I（显式格式）

利用 u 关于 t 的向前差商，关于 x 的二阶中心差商，即由(2-1-4)和(2-1-7)两式得

$$Lu = \left[\frac{\partial u(j,n)}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}u(j,n)\right]$$

$$= \frac{u(j,n+1) - u(j,n)}{\tau} - \frac{u(j+1,n) - 2u(j,n) + u(j-1,n)}{h^2} + R^{\rm I} \quad (2\text{-}1\text{-}8)$$

式中

$$R^{\rm I} = \frac{2h^2}{4!}\frac{\partial^4}{\partial x^4}u(j,n) - \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(j,n) + \cdots$$

用 u_j^n 表示 $u(j,n)$ 的近似值得

$$L_{h,\tau}^{\rm I} u = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} - \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} = 0 \quad (2\text{-}1\text{-}9)$$

这就是源方程(2-1-1)的差分方程。其中 $L_{h,\tau}^{\rm I}$ 称为差分算子。

显然

$$Lu = L_{h,\tau}^{\rm I} u + R^{\rm I}$$

$R^{\rm I}$ 称为在点(j,n)以 $L_{h,\tau}^{\rm I} u$ 逼近 Lu 的截断误差。设$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$和$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$在解域内有界，当 h、τ 很小时，仅取 $R^{\rm I}$ 中的最低阶值，即当 $h\to 0$、$\tau\to 0$ 时有

$$R^{\rm I} = \frac{2h^2}{4!}\frac{\partial^4}{\partial x^4}u(j,n) - \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(j,n) = O(\tau + h^2)$$

如果用前面引入的差分符号来写，则式(2-1-9)式可以简写为

$$L_{h,\tau}^{\rm I} u = \Delta_\tau u_j^n - \delta_h^2 u_j^n = 0 \quad (2\text{-}1\text{-}10)$$

令 $$r = \frac{\tau}{h^2} \quad (2\text{-}1\text{-}11)$$

则(2-1-9)式又可以写成

$$u_j^{n+1} = (1-2r)u_j^n + r(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \quad (2\text{-}1\text{-}12)$$

这实际上是一组线性代数方程组，由此方程组可知，在(j,n)点列方程时，要用到$(j+1,n)$，$(j-1,n)$，$(j,n+1)$三个点。见图 2-1-1。

图中，符号△表示已知值，○表示未知值，◇表示泰勒展开点。

由(2-1-12)式知，当第 n 层 u 值已知时，可以直接求出第 $n+1$ 层上的值。这种差分格式称

为显式格式。

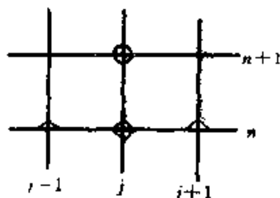


图 2-1-1 格式Ⅰ示意图

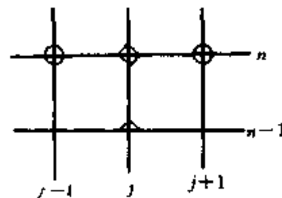


图 2-1-2 格式Ⅱ示意图

格式Ⅱ(隐式格式)

用$u(x,t)$对t的向后差商公式，即由(2-1-5)式和(2-1-7)式有

$$\nabla_\tau u_j^n - \delta_h^2 u_j^n = 0 \qquad (2\text{-}1\text{-}13)$$

可以变形为

$$(1+2r)u_j^n - ru_{j-1}^n - ru_{j+1}^n = U_j^{n-1} \qquad (2\text{-}1\text{-}14)$$

(2-1-14)式也是一个线性代数方程组。在点(j,n)建立这种格式时，用到$(j+1,n)$、$(j-1,n)$、$(j,n-1)$三点。见图 2-1-2。

和格式Ⅰ不同的是，已知第$n-1$层上的u值后，要求第n层的u值时，须解线性方程组，这种格式称为隐式格式。

很容易证明，当$h\to 0$、$\tau\to 0$时，格式Ⅱ的截断误差为

$$R^{\text{I}} = O(\tau + h^2)$$

格式Ⅲ(Crank—NicoLson 格式)

前面的两种格式中，u对t的偏导数都是用向前或向后差商来代替的。现在我们对t的中心差商来构造差分格式。

在$\left(j,n+\frac{1}{2}\right)$点将$u$作泰勒展开

$$u(j,n+1) = \left(u + \frac{\tau}{2}u_t + \frac{\tau^2}{8}u_{tt} + \frac{\tau^3}{48}u_{ttt} + \cdots\right)_{j,n+\frac{1}{2}}$$

$$u(j,n) = \left(u - \frac{\tau}{2}u_t + \frac{\tau^2}{8}u_{tt} - \frac{\tau^3}{48}u_{ttt} + \cdots\right)_{j,n+\frac{1}{2}}$$

两式相减得

$$\frac{\partial}{\partial t}u\left(j,n+\frac{1}{2}\right) = \frac{u(j,n+1)-u(j,n)}{\tau} - \frac{\tau^2}{24}\frac{\partial^3}{\partial t^3}u\left(j,n+\frac{1}{2}\right) + \cdots$$

下面来求$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u\left(j,n+\frac{1}{2}\right)$。将$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$在$\left(j,n+\frac{1}{2}\right)$点作泰勒展开

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(j,n+1) = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\tau}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial t} + \frac{\tau^2}{8}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2} + \cdots\right)_{j,n+\frac{1}{2}}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(j,n) = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\tau}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2\partial t} + \frac{\tau^2}{8}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2} - \cdots\right)_{j,n+\frac{1}{2}}$$

两式相加得

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u\left(j,n+\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 u(j,n+1)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u(j,n)}{\partial x^2}\right]-\frac{\tau^2}{8}\frac{\partial^4 u(j,n+\frac{1}{2})}{\partial x^2\partial t^2}+\cdots$$

而

$$\frac{\partial^2 u(j,n+1)}{\partial x^2}=\frac{u(j+1,n+1)-2u(j,n+1)+u(j-1,n+1)}{h^2}+O(h^2)$$

$$\frac{\partial^2 u(j,n)}{\partial x^2}=\frac{u(j+1,n)-2u(j,n)+u(j-1,n)}{h^2}+O(h^2)$$

这样，就可以得到中心差分格式

$$L_{h,\tau}^{\text{Ⅲ}}u_j^{n+\frac{1}{2}}=\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}-\frac{1}{2}\left[\frac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n-1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2}+\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}\right]$$
$$+O(h^2+\tau^2)$$

或
$$L_{h,\tau}^{\text{Ⅲ}}u_j^{n+\frac{1}{2}}=\delta_t u_j^{n+\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}(\delta_x^2 u_j^{n+1}\delta_x^2 u_j^n) \tag{2-1-15}$$

(2-1-15)式还可以写为

$$-\frac{r}{2}u_{j+1}^{n+1}+(1+r)u_j^{n+1}-\frac{r}{2}u_{j-1}^{n+1}=(1-r)u_j^n+\frac{r}{2}u_{j+1}^n+\frac{r}{2}u_{j-1}^n \tag{2-1-16}$$

格式Ⅲ的截断误差为

$$R^{\text{Ⅲ}}=O(h^2+\tau^2)$$

这个格式的特点是在$\left(j,n+\frac{1}{2}\right)$处，即格边上而不是结点上作泰勒展开，但在格式中却未出现格边量，由于对时间 t 和空间 x 的偏导数都用中心差商，使得格式的截断误差变小了。

注意到，当 u 在$\left(j,n+\frac{1}{2}\right)$点上展开时，用到了周围 6 个结点上的量，见图 2-1-3。所以该格式又称为六点格式。

显然，它是一个隐式格式。

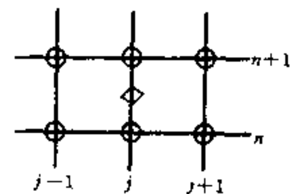


图 2-1-3 格式Ⅲ示意图

格式Ⅳ (Richardson 格式)

将$\frac{\partial u}{\partial t}$在$(j,n)$点取中心差分，但是步长放大一倍，而$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$的差商逼近同格式Ⅰ。这样可以得到

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{j,n}=\frac{u(j,n+1)-u(j,n-1)}{2\tau}-\frac{\tau^2}{6}\frac{\partial^3 u(j,n)}{\partial t^3}+\cdots$$
$$-\frac{u(j+1,n)-2u(j,n)+u(j-1,n)}{h^2}$$
$$+\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u(j,n)}{\partial x^4}+\cdots$$

差分方程为

$$L_{h,\tau}^{\text{Ⅳ}}u=\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\tau}-\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}$$

$$= \frac{1}{2}(\Delta_t u_j^n + \Delta_t u_j^{n-1}) - \delta_x^2 u_j^n = 0 \tag{2-1-17}$$

截断误差为

$$R^N = O(h^2 + \tau^2)$$

(2-1-17)式可以变形为

$$u_j^{n+1} = 2r(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + u_j^{n-1} \tag{2-1-18}$$

这是一个全二阶精度的显式格式。注意到这个格式和前面的三种有一个根本的不同，即前几种格式，无论是显式还是隐式，差分方程只是出现 n 层和 $n+1$ 层，或者 n 层和 $n-1$ 层上的量。面格式Ⅳ的差分方程(2-1-18)式中，却同时出现了 $n+1$、n 和 $n-1$ 三层上的量，所以这种格式又称为三层格式。

下面讨论初边值条件的离散。对于初值条件

$$u|_{t=0} = \Phi(x) \qquad 0 \leqslant x \leqslant 1 \tag{2-1-19}$$

式中 $\Phi(x)$ 为已知函数，上式离散得

$$u_j^0 = \Phi(jh) \qquad j = 0,1,2,\cdots N \qquad N = 1/h \tag{2-1-20}$$

对于第一边界条件

$$\left.\begin{aligned} u(0,t) &= \mu_1(t) \\ u(1,t) &= \mu_2(t) \end{aligned}\right\} \quad 0 < t \leqslant T \tag{2-1-21}$$

式中 $\mu_1(t)$ 和 $\mu_2(t)$ 为已知函数，离散得下式

$$\left.\begin{aligned} u_0^n &= \mu_1(n\tau) \\ u_N^n &= \mu_2(n\tau) \end{aligned}\right\} \quad n = 1,2\cdots M; M = \frac{T}{\tau} \tag{2-1-22}$$

由于第二种边界条件在数学上是第三边界条件的特例，因此下面仅研究第三边界条件

$$\left.\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \lambda_1(t)u\right)\Big|_{x=0} &= \nu_1(t) \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \lambda_2(t)u\right)\Big|_{x=1} &= \nu_2(t) \end{aligned}\right\} 0 < t \leqslant T \tag{2-1-23}$$

式中 $\lambda_1(t) \geqslant 0$、$\lambda_2(t) \geqslant 0$、$\nu_1(t)$ 和 $\nu_2(t)$ 是已知函数。由于第三边界条件中有导数项，需要用差分离散，下面介绍三种离散化方法。

方法一

在 $(0,t)$ 用前差，在 $(1,t)$ 用后差，有

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{0,n} = \frac{u(1,n) - u(0,n)}{h} - \frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \cdots$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{1,n} = \frac{u(N,n) - u(N-1,n)}{h} + \frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x_2} + \cdots$$

这样，得到差分近似为

$$\frac{u_1^n - u_0^n}{h} - \lambda_1(n\tau)u_0^n = \nu_1(n\tau)$$

$$\frac{u_N^n - u_{N-1}^n}{h} - \lambda_2(n\tau)u_N^n = \nu_2(n\tau) \tag{2-1-24}$$

经过这样的处理，就不需要求域外的点。其截断误差 $R=O(h)$。由于控制方程差分格式的截断误差常达到 $R=O(h^2)$，因此需要构造二阶精度的边界条件离散格式。

方法二

用两倍步长的中心差商代替(2-1-24)式中的前差和后差得

$$\left.\begin{aligned}&\frac{u_1^n-u_{-1}^n}{2h}-\lambda_1(n\tau)u_0^n=\nu_1(n\tau)\\&\frac{u_{N+1}^n-u_{N-1}^n}{2h}-\lambda_2(n\tau)u^n=\nu_2(n\tau)\end{aligned}\right\}\tag{2-1-25}$$

上式出现了求解区域外的值 u_{-1}^n 和 u_{N+1}^n，需要求出来。设控制方程(2-1-1)式在边界上也成立，则可以得到边界点的控制方程差分格式，以格式 I 为例，由(2-1-12)式得

$$\left.\begin{aligned}&u_0^{n+1}=(1-2r)u_0^n+r(u_1^n+u_{-1}^n)\\&u_N^{n+1}=(1-2r)u_N^n+r(u_{N+1}^n+u_{N-1}^n)\end{aligned}\right\}\tag{2-1-26}$$

将(2-1-25)式代入上式消去 u_{-1}^n 和 u_{N+1}^n 得

$$\left.\begin{aligned}&u_0^{n+1}=[1-2r-2hr\lambda_1(n\tau)]u_0^n+2ru_1^n-2rh\nu_1(n\tau)\\&u_N^{n+1}=[1-2r+2hr\lambda_2(n\tau)]u_N^n+2ru_{N-1}^n+2rh\nu_2(n\tau)\end{aligned}\right\}\tag{2-1-27}$$

(2-1-27)式由于采用了中心差商，具有二阶精度，优于方法一的差分格式。

方法三

假设边界条件(2-1-23)式中第一式在 $x=h/2$ 点成立，在该点取中心差商得

$$\frac{u_1^n-u_0^n}{h}-\lambda_1(n)u_{\frac{1}{2}}^n=\nu_1(n)$$

由泰勒展开得

$$u_{\frac{1}{2}}^n=\frac{1}{2}(u_0^n+u_1^n)+O(h^2)$$

代入上式得

$$\frac{u_1^n-u_0^n}{h}-\lambda_1(n)\frac{1}{2}(u_0^n+u_1^n)=\nu_1(n)\tag{2-1-28a}$$

同理

$$\frac{u_N^n-u_{N-1}^n}{h}-\lambda_2(n)\frac{1}{2}(u_N^n+u_{N-1}^n)=\nu_2(n)\tag{2-1-28b}$$

上式和方法二的精度一样，也是 $O(h^2)$。

§2.2　差分问题的解法

前面将微分方程及初边值条件离散成差分格式，本节介绍如何进行计算，针对第一类边界条件讨论，第三类边界条件情况与此类似。

对于差分格式 I 的第一类边界条件为

$$\begin{aligned}&u_j^{n+1}=(1-2r)u_j^n+r(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)\\&j=1,2,\cdots,N-1;\qquad N=1/h\\&n=0,1,\cdots,M-1;\qquad M=T/\tau\end{aligned}\tag{2-2-1}$$

初始条件

$$u_j^0=\varphi(jh),\qquad j=0,1,\cdots,N\tag{2-2-2}$$

边界条件

$$u_0^n=\mu_1(n\tau),\qquad n=1,2,\cdots,M$$

$$u_N^n = \mu_2(n\tau) \tag{2-2-3}$$

注意到，$n=0$ 时，有

$$u_0^0 = \mu_1(0) = \varphi(0)$$
$$u_N^0 = \mu_2(0) = \varphi(Nh) = \varphi(1)$$

由(2-1-12)式，再利用初始条件和边界条件，就可以沿时间增长的方向推进计算。具体说来，就是由(2-1-12)式，取 $n=0$，则

$$u_j^1 = (1-2r)u_j^0 + r(u_{j+1}^0 + u_{j-1}^0)$$
$$j = 1,2,\cdots,N-1;$$

这样可以算出 $u_1^1 \sim u_{N-1}^1$ 各值。而 u_0^1、u_N^1 则是由边值条件(2-2-3)式算出的。至此，$n=1$ 时刻的全部量就得到了。然后，用同样的方法，再求 $n=2$ 时刻的量，依此下去推进计算。

当 n 固定时，由(2-1-12)式求不同 j 的 u 值，则可写为

$$\begin{aligned}
u_1^{n+1} &= (1-2r)u_1^n + ru_2^n + ru_0^n \\
u_2^{n+1} &= ru_1^n + (1-2r)u_2^n + u_3^n \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots \\
u_{N-2}^{n+1} &= ru_{N-3}^n + (1-2r)u_{N-2}^n + ru_{N-1}^n \\
u_{N-1}^{n+1} &= ru_{N-2}^n + (1-2r)u_{N-1}^n + ru_N^n
\end{aligned}$$

以上方程组的右端关于 $u_j^n(j=1,2,\cdots,N-1)$ 的系数组成了一个三对角矩阵 A，即

$$A = \begin{bmatrix} 1-2r & r & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ r & 1-2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & & & \\ \cdots & & \cdots & & \cdots & 0 \\ 0 & & \cdots & & 1-2r & r \\ 0 & & \cdots & 0 \quad \cdots & r & 1-2r \end{bmatrix}$$

取

$$\boldsymbol{u}^n = \begin{bmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1}^n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{f}^n = \begin{bmatrix} ru_0^n \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ ru_N^n \end{bmatrix} = r\begin{bmatrix} \mu_1(n\tau) \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ \mu_2(n\tau) \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\varphi} = \begin{bmatrix} \varphi(h) \\ \varphi(2h) \\ \vdots \\ \varphi((N-1)h) \end{bmatrix}$$

则方程组(2-1-12)，(2-2-2)，(2-2-3)式可写为

$$\begin{cases} \boldsymbol{u}^{n+1} = A\boldsymbol{u}^n + \boldsymbol{f}^n \\ \boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{\varphi} \end{cases} \quad n = 0,1,\cdots,M-1 \tag{2-2-4}$$

可见式中的 f^n 和 φ 分别代表边界条件和初始条件。

格式Ⅱ

由(2-1-14)式可得相应的差分方程为

$$(1+2r)u_j^n - ru_{j-1}^n - ru_{j+1}^n = u_j^{n-1}$$
$$j=1,2,\cdots,N-1;\quad n=1,2,\cdots,M;$$
$$u_j^0=\varphi(jh)\qquad j=0,1,\cdots,N$$
$$\left.\begin{aligned}u_0^n&=\mu_1(n\tau)\\ u_N^n&=\mu_2(n\tau)\end{aligned}\right\}\quad n=1,2,\cdots,M$$

具体的解题步骤：

1. 由(2-2-2)式可求得 $u_j^0(j=0,1,2,\cdots,N)$。
2. 令 $n=1$，由(2-1-14)式有

$$(1+2r)u_j^1 - r(u_{j+1}^1 - ru_{j-1}^1) = u_j^0$$
$$j=1,2,\cdots,\quad N-1$$

或者可以写成为

$$\begin{aligned}
-ru_0^1+(1+2r)u_1^1-ru_2^1 &= u_1^0\\
-ru_1^1+(1+2r)u_2^1-ru_3^1 &= u_0^0\\
\cdots\qquad\qquad\cdots&\\
-ru_{N-3}^1+(1+2r)u_{N-2}^1-ru_{N-1}^1 &= u_{N-2}^0\\
-ru_{N-2}^1+(1+2r)u_{N-1}^1-ru_N^1 &= u_{N-1}^0
\end{aligned}$$

设方程组的系数矩阵为 B，则

$$B=\begin{bmatrix}
1+2r & -r & 0 & \cdots & \cdots & 0\\
-r & 1+2r & -r & 0 & \cdots & 0\\
0 & & & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots 0\\
0 & \cdots & 0 & & 1+2r & -r\\
0 & \cdots & \cdots & 0 & -r & 1+2r
\end{bmatrix}$$

这是一个 $N-1$ 阶的三对角矩阵。

由(2-2-3)式，可得

$$u_0^1=\mu_1(\tau),\quad u_N^1=\mu_2(\tau)$$

以上方程组用向量形式写出为

$$\begin{cases}Bu^1=u^0+f^1\\ u^0=\varphi\end{cases}$$

解此方程组可以得到 u_j^1 的值。对于系数矩阵为三对角形式的线性代数方程组，用追赶法来求解是非常方便的。对于追赶法求解线性代数方程组的解法，可以查阅有关书籍。

当 $n=1$ 层的量求出后，再令 $n=2$，用同样的方法来求解下一层。

方程(2-1-14)、(2-2-2)、(2-2-3)可以写成

$$\left.\begin{aligned}Bu^n&=u^{n-1}+f^n\\ u^0&=\varphi\end{aligned}\right.\quad n=1,2,\cdots,M\tag{2-2-5}$$

格式Ⅲ

相应的差分问题是

$$2(1+r)u_j^{n+1}-ru_{j+1}^{n+1}-ru_{j-1}^{n+1}=2(1-r)u_j^n+ru_{j+1}^n+ru_{j-1}^n$$

$$j=1,2,\cdots,\quad N-1;\quad n=0,1,\cdots,\quad M-1$$

$$\left.\begin{aligned}u_j^0&=\varphi(jh)\\u_0^n&=\mu_1(n\tau)\\u_N^n&=\mu_2(n\tau)\end{aligned}\right\}\quad n=0,1,2,\cdots,M$$

同格式Ⅰ一样，这也是一个隐式格式，每一层的值都需要解一个线性代数方程组，但是系数矩阵也是三对角矩阵(读者可自证)，可采用追赶法来求解。

以上方程组的向量形式可以写成

$$\left.\begin{aligned}&(E+B)\boldsymbol{u}^{n+1}=(E+A)\boldsymbol{u}^n+\boldsymbol{f}^{n+1}+\boldsymbol{f}^n\\&\quad n=0,1,\quad\cdots,\quad M-1\\&\boldsymbol{u}^0=\boldsymbol{\varphi}\end{aligned}\right\}\tag{2-2-6}$$

其中 E 是 $N-1$ 阶的单位矩阵。

格式Ⅳ

格式Ⅳ的差分问题可以写为

$$u_j^{n+1}=u_j^{n-1}+2r(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n$$

$$j=1,2,\cdots,\quad N-1,n=1,2,\cdots,\quad M-1$$

$$\left.\begin{aligned}u_0^n&=u_1(n\tau)\\u_N^n&=u_2(n\tau)\end{aligned}\right\}\quad n=1,2,\cdots,M$$

$$u_j^0=\varphi(jh)\qquad j=0,1,2,\cdots,N$$

注意到，这是一个三层格式。必须预先知道前两层的值才能根据方程求出第三层上的值。例如，求 $n=1$ 层上的值时，则缺 $n=-1$ 层上的值(在域外)。因此，要用其它的方法求出这些值，然后再逐层求下去。

设系数矩阵为 C，则

$$C=-2r\begin{bmatrix}2&-1&0&\cdots&\cdots&0\\-1&2&-1&0&\cdots&0\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&0\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&2&-1\\0&\cdots&\cdots&0&-1&2\end{bmatrix}\tag{2-2-7}$$

方程组(2-1-18)、(2-2-2)、(2-2-3)式可以写为

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{u}^{n+1}=C\boldsymbol{u}^n+\boldsymbol{u}^{n-1}+2\boldsymbol{f}^n\\&\boldsymbol{u}^0=\boldsymbol{\varphi}\\&\boldsymbol{u}^1(\text{另外给出})\end{aligned}\right\}\tag{2-2-8}$$

为了以后讨论方便，将三层格式化为二层格式。令

$$\boldsymbol{v}^{n+1}=\boldsymbol{u}^n$$

则

$$\boldsymbol{u}^{n+1}=C\boldsymbol{u}^n+\boldsymbol{v}^n+2\boldsymbol{f}^n$$

引入 $2(N-1)$ 维向量 W^n、G^n，即

$$W^n=\begin{bmatrix}u^n\\ v^n\end{bmatrix}=[u_1^n,u_2^n,\cdots,u_{N-1}^n,v_1^n,\cdots,v_{n-1}^n]^T$$

$$G^n=2\begin{bmatrix}f^n\\ 0\end{bmatrix}=2[ru_0^n,0,\cdots,0,ru_N^n,0,\cdots,0]^T$$

方程组(2-2-8)式可以写为

$$\begin{cases}W^{n+1}=HW^n+G^n & n=1,2,\cdots,M-1\\ W^1=\begin{bmatrix}u^1\\ v^1\end{bmatrix}\end{cases}\tag{2-2-9}$$

式中

$$H=\begin{bmatrix}C & E\\ E & 0\end{bmatrix}$$

其中 E 为 $N-1$ 阶单位矩阵。

§2.3 差分格式的稳定性

差分格式的稳定性是差分格式的定性分析中最重要的问题之一。在本节里，将对一些抛物型方程的差分格式进行分析。

2.3.1 ε图(小扰动离散稳定试验)

这里，首先用直观的方法来考察一下格式Ⅰ的稳定性。

在(2-1-12)式中，取 $r=1/2$，这时的格式最简单，即有

$$u_j^{n+1}=u(_{j+1}^n+u_{j-1}^n)$$

假设在计算过程中在初始时刻 j_0 点，即 $(j_0,0)$ 点产生误差 ε，其余一切计算(包括初始值的其它点、边界点、以及以后的计算过程)都是精确的。现在来考察 ε 的传播情况。

由以上假设可知，差分方程的精确解应满足

$$\left.\begin{aligned}&u^{n+1}=\frac{1}{2}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)\\ &j=1,2,\cdots,N-1\quad n=0,1,\cdots,M-1\\ &u_j^0=\varphi(jh)\qquad j=1,2,\cdots,N-1\\ &u_0^n=\mu_1(n\tau)\\ &u_N^n=\mu_2(n\tau)\qquad n=0,1,\cdots,M\end{aligned}\right\}\tag{2-3-1}$$

由于误差 ε 而产生的差分方程的近似解 $\tilde{u}_j^n$ 应满足

$$\left.\begin{aligned}&\tilde{u}_j^{n+1}=\frac{1}{2}(\tilde{u}_{j+1}^n+\tilde{u}_{j-1}^n)\\ &\tilde{u}_j^0=\begin{cases}\varphi(jh) & j\neq j_0\\ \varphi(jh)+\varepsilon & j=j_0\end{cases}\\ &\tilde{u}_0^n=\mu_1(n\tau)\\ &\tilde{u}_N^n=\mu_2(n\tau)\end{aligned}\right\}\tag{2-3-2}$$

误差 $\varepsilon_j^n=\tilde{u}_j^n-u_j^n$，则可得误差方程

$$\left.\begin{aligned}&\varepsilon_j^{n+1}=\frac{1}{2}(\varepsilon_{j+1}^n+\varepsilon_{j-1}^n)\\&\varepsilon_j^0=\begin{cases}0 & j\neq j_0\\ \varepsilon & j=j_0\end{cases}\\&\varepsilon_0^n=\varepsilon_N^n=0\end{aligned}\right\}\tag{2-3-3}$$

由误差方程可得误差分布表，见表 2-3-1。

表 2-3-1　误差分布表

$n=3$		0.125ε	0	0.375ε	0	0.375ε	0	0.125ε	
$n=2$			0.25ε	0	0.5ε	0	0.25ε		
$n=1$				0.5ε	0	0.5ε			
$n=0$					ε				
n / j	j_0-4	j_0-3	j_0-2	j_0-1	j_0	j_0+1	j_0+2	j_0+3	j_0+4

由此可见，误差是在逐层减少。所以当步长比 $r=1/2$ 时，格式 I 是稳定的。

设 $r=1$，此时误差方程为

$$\left.\begin{aligned}&\varepsilon_j^{n+1}=\varepsilon_{j-1}^n-\varepsilon_j^n+\varepsilon_{j+1}^n\\&\varepsilon_j^0=\begin{cases}0 & j\neq j_0\\ \varepsilon & j=j_0\end{cases}\\&\varepsilon_0^n=0\\&\varepsilon_N^n=0\end{aligned}\right\}\tag{2-3-4}$$

其对应的误差分布表见表 2-3-2。

表 2-3-2　误差分布表

$n=3$	0	ε	-3ε	6ε	-7ε	6ε	-3ε	ε	0
$n=2$	0	0	ε	-2ε	3ε	-2ε	ε	0	0
$n=1$	0	0	0	ε	$-\varepsilon$	ε	0	0	0
$n=0$	0	0	0	0	ε	0	0	0	0
n / j	j_0-4	j_0-3	j_0-2	j_0-1	j_0	j_0+1	j_0+2	j_0+3	j_0+4

可见，误差是在逐层扩大。这样，就称 $r=1$ 时，格式 I 是不稳定的。

用 ε 图法研究格式的稳定性，特点是直观，但它不能定量地给出步长比 r 在什么范围内变动时，才使差分格式稳定。要想定量地研究差分格式的稳定性条件，还必须用其它的方法。

2.3.2　初值问题的稳定性

稳定性可以如下定义：源方程的离散化方程，在逐层进行数值求解时，它对以任何方式引入的小扰动干扰（误差）有抑制能力，能使干扰不产生实质性增长，以至淹没真解，则称此条件下的离散化方程是稳定的，否则就是不稳定的。

差分方程的稳定性定义还有其它表述方法。以后在处理问题时，为了方便起见，还可能引用不同的定义。

稳定性是离散化方程的重要特性。应该说明稳定性不限于初值问题，还有边值问题的稳定性、非线性计算稳定性等。在这里，主要讨论初值问题的稳定性。

由(2-2-4)式，差分格式 I 的初值问题可以写为

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{u}^{n+1} &= H\boldsymbol{u}^n + \boldsymbol{f}^n \\ \boldsymbol{u}^0 &= \boldsymbol{\varphi} \end{aligned}\quad n = 0,1,\cdots,M-1\right\} \tag{2-3-5}$$

$$\boldsymbol{u}^0 = [u_1^n, u_2^n, \cdots, u_{N-1}^n]^T$$

其中，H 为 $N-1$ 阶方阵，设初始误差为 ε^0，而以后的计算是精确的。

差分方程的近似解为

$$\left.\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{u}}^n &= H\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1} + \boldsymbol{f}^{n-1} \\ \tilde{\boldsymbol{u}}^0 &= \boldsymbol{\varphi} + \boldsymbol{\varepsilon}^0 \end{aligned}\right\} \tag{2-3-6}$$

误差 $\boldsymbol{\varepsilon}^n = \tilde{\boldsymbol{u}}^n - \boldsymbol{u}^n$ 所满足的方程为

$$\boldsymbol{\varepsilon}^n = H\boldsymbol{\varepsilon}^{n-1}$$

初始误差

$$\boldsymbol{\varepsilon}^0 = [\varepsilon_1^0, \varepsilon_2^0, \cdots, \varepsilon_{N-1}^0]^T \tag{2-3-5}$$

则

$$\boldsymbol{\varepsilon}^1 = H\boldsymbol{\varepsilon}^0$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^2 = H\boldsymbol{\varepsilon}^1 = H^2\boldsymbol{\varepsilon}^0$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^n = (H)^n\boldsymbol{\varepsilon}^0$$

由范数的性质可知

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}^n\| \leqslant \|H\|^n \|\boldsymbol{\varepsilon}^0\|$$

可见，不论 n 为何值，如果 $\|H\|^n$ 不大于 c(c 与 h、τ 无关的常数)，则有

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}^n\| \leqslant c\|\boldsymbol{\varepsilon}^0\|$$

这样，误差 ε^0 对以后各层的影响是有限的。若 $\|H\|<1$，则误差逐层减少。在这两种情况下，都说差分格式是稳定的。所以还可以一般地定义差分格式的稳定性为：若 $\boldsymbol{\varepsilon}^n$ 在一定范数下满足不等式

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}^n\| \leqslant c\|\boldsymbol{\varepsilon}^0\| \qquad (n \geqslant 1) \tag{2-3-6}$$

则说差分格式是稳定的，其中 c 是与 h，τ 无关的常数。

2.3.3 格式 I 的稳定性

由(2-2-4)式有

$$\begin{cases} \boldsymbol{u}^{n+1} = A\boldsymbol{u}^n + \boldsymbol{f}^n \\ \boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{\varphi} \end{cases} \qquad n = 0,1,\cdots,M-1$$

设方程的近似解为 $\tilde{\boldsymbol{u}}^n$，

$$\tilde{\boldsymbol{u}}^n = [\tilde{u}_1^n, \tilde{u}_2^n, \cdots, \tilde{u}_{N-1}^n]^T$$

在初始值上有误差 $\boldsymbol{\varepsilon}^0$。$\tilde{\boldsymbol{u}}^n$ 满足差分方程组

$$\begin{cases} \tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1} = A\tilde{\boldsymbol{u}}^n + \boldsymbol{f}^n \\ \boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{\varphi} + \boldsymbol{\varepsilon}^0 \end{cases}$$

误差 $\varepsilon^n=\tilde{u}^n-u^n$ 满足下列方程

$$\begin{cases}\varepsilon^{n+1}=A\varepsilon^n\\ \varepsilon^0\ 为初始值\end{cases}$$

可以得到

$$\varepsilon^n=(A)^n\varepsilon^0 \tag{2-3-7}$$

若

$$\|A\|\leqslant 1$$

则有

$$\|\varepsilon^n\|\leqslant\|\varepsilon^0\|$$

按照稳定性的定义，此时差分格式是稳定的。下面考察怎样才能使 A 的范数小于 1。

注意到距阵 A 是一个实对称矩阵，取 L_2 范数，则有

$$\|A\|_2=|\lambda_{max}|$$

λ_{max}是矩阵 A 的绝对值最大的特征值。这样，格式Ⅰ稳定的充分条件是

$$|\lambda_i|\leqslant 1 \qquad i=1,2,\cdots,N-1 \tag{2-3-8}$$

用反证法可以证明这一条件也是必要的。

假定格式Ⅰ是稳定的，而$|\lambda_{max}|>1$，可分两种情况来讨论：

1. 若 ε^0 恰好是 A 的与 λ_{max}对应的特征向量，即有

$$A\varepsilon^0=\lambda_{max}\varepsilon^0$$

左乘 A，有

$$AA\varepsilon^0=A\lambda_{max}\varepsilon^0=\lambda_{max}A\varepsilon^0=\lambda_{max}\lambda_{\lambda max}\varepsilon^0$$

这样，可以得到

$$(A)^n\varepsilon^0=(\lambda_{max})^n\varepsilon^0$$

所以

$$\varepsilon^n=(A)^n\varepsilon^0=(\lambda_{max})^n\varepsilon^0 \tag{2-3-9}$$

可见有

$$\lim_{n\to\infty}\varepsilon^n\to\infty$$

但这显然与原稳定的假设不相符合，所以$|\lambda_{max}|$不小于 1。

2. 若 ε^0 不是 λ_{max}的特征向量。由矩阵理论知道，对于实对称矩阵来说，与其相异特征值相对应的特征向量必定正交，且特征向量互相线性无关（或称为线性独立）。

设 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{N-1}$为 A 的相异特征值，与其相应的特征向量是 $V_1,V_2,\cdots,V_{N-1}$。A 共有 $N-1$ 个特征向量。

ε^0 可唯一地表示为 A 的 $N-1$ 个线性无关的正交特征向量 $V_1,V_2\cdots,V_{N-1}$的线性组合

$$\varepsilon^0=\alpha_1V_1+\alpha_2V_2+\alpha_{N-1}V_{N+1} \tag{2-3-10}$$

其中 $AV_i=\lambda_iV_i$。前面已经说过，这些特征向量是一个标准正交系，即有

$$(V_i,V_j)=\begin{cases}0 & i\neq j\\ 1 & i=j\end{cases}$$

这样，有

$$\begin{aligned}\varepsilon^n&=(A)^n\varepsilon^0\\&=\alpha_1(A)^nV_1+\alpha_2(A)^nV_2+\cdots+\alpha_{N-1}(A)^nV_{N-1}\end{aligned}$$

$$= \alpha_1 \lambda_1^n V_1 + \alpha_2 \lambda_2^n V_2 + \cdots + \alpha_{N-1} \lambda_{N-1}^n V_{N-1} \tag{2-3-11}$$

其中 $\lambda_{max} > 1$，所以仍有

$$\lim_{n \to \infty} \varepsilon^0 \to \infty$$

这与原假设不符，所以

$$|\lambda_i| \leqslant 1 \qquad i = 1, 2, \cdots, N-1$$

是格式 I 稳定的充要条件。

下面确定 r 的范围。求 A 的特征值 λ_k，此时 A 的特征多项式为

$$D_{N-1}(\lambda) = \begin{vmatrix} 1-2r-\lambda & r & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ r & 1-2r-\lambda & r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 1-2r-\lambda & r \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & r & 1-2r-\lambda \end{vmatrix}$$

方程 $D_{N-1}(\lambda)=0$ 的根就是特征值。直接求解这个方程是比较麻烦的（特别是当 N 的阶数较高时）。但是根据 $D_{N-1}(\lambda)$ 的特点，可以用一个很巧妙的方法求出。令

$$1 - 2r - \lambda = 2\rho$$

将 $D_{N-1}(\lambda)$ 按第一行展开，有

$$D_{N-1}(\lambda) = 2\rho D_{N-2}(\lambda) - r^2 D_{N-3}(\lambda)$$

这是一个递推公式，可以写成

$$D_{m-1} = 2\rho D_{m-2} - r^2 D_{m-3} \qquad m = 3, 4, \cdots, N \tag{2-3-12}$$

由(2-3-12)式，$m=3$ 时，

$$D_2 = 2\rho D_1 - r^2 D_0$$

又因

$$D_1 = 1 - 2r - \lambda = 2\rho$$

$$D_2 = (2\rho)^2 - r^2$$

所以

$$D_0 = \frac{1}{r^2}(4\rho^2 - 4\rho^2 + r^2) = 1$$

如将 λ 暂时固定，(2-3-12)式可以视为 $D_m(\lambda)$ 的关于 m 的二阶线性差分方程。对于线性常系数差分方程有类似于常系数常微分方程的解法。我们以二阶为例进行说明。设有

$$a y_{k+2} + b y_{k+1} + c y_K = 0 \tag{2-3-13}$$

的常系数差分方程。

定义一个差分算子 E，

$$E y_k = y_{k+1}, \quad E^2 y_k = E(E y_k) = E(y_{k+1}) = y_{k+2}$$

$$\cdots\cdots$$

若设

$$y_k = e^{k\Delta x \cdot r} = (e^{\Delta x \cdot r})^k = \mu^k$$

则

$$Ey_k=\mu^{k+1},\quad E^2y_k=\mu^{k+2},\cdots$$

由差分的定义可知

$$E(f_1+f_2+\cdots+f_n)=Ef_1+Ef_2+\cdots+Ef_n$$

$$E(cf)=cEf$$

$$E(c)=0$$

其中 c 为常数。方程(2-3-13)可以写为

$$aE^2y_k+bEy_k+cy_k=0$$

或

$$(aE^2+bE+c)y_k=0$$

设

$$y_k=e^{k\Delta x\cdot r}=\mu^k$$

代人方程有

$$a\mu^{k+2}+b\mu^{k+1}+c\mu^k=0$$

所以有

$$a\mu^2+b\mu+c=0$$

可以解出

$$\mu_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

这样就得到方程的两个特解

$$y_{k1,2}=(\mu_{1,2})^k\qquad(k=1,2,\cdots,N)$$

注意到,如果 y_k 是方程(4-3-13)的特解,则 cy_k 也是方程的解,c 为任意常数,而特解的线性组合

$$y=c_1y_{k1}+c_2y_{k2}$$

是方程(4-3-13)的解,这是因为

$$\begin{aligned}E(c_1y_{k1}+c_2y_{k2})&=E(c_1y_{k1})+E(c_2y_{k2})\\&=c_1Ey_{k1}+c_2Ey_{k2}=0\end{aligned}$$

由于 c_1,c_2 均为任意常数,所以 $y=c_1y_{k1}+c_2y_{k2}$ 是方程(4-3-13)的通解。

具体到(2-3-12)式可以解得

$$\mu_1=\rho+\sqrt{\rho^2-r^2}$$

$$\mu_2=\rho-\sqrt{\rho^2-r^2}$$

(2-3-12)式的通解为

$$D_m=c_1(\mu_1)^m+c_2(\mu_2)^m$$

由

$$D_0=c_1(\mu_1)^0+c_2(\mu_2)^0=1$$

$$D_1=c_1\mu_1+c_2\mu_2=2\rho$$

可以解出

$$c_1=\frac{\rho+\sqrt{\rho^2-r^2}}{2\cdot\sqrt{\rho^2-r^2}},\qquad c_2=\frac{-\rho+\sqrt{\rho^2-r^2}}{2\cdot\sqrt{\rho^2-r^2}}$$

于是解为

$$D_m = \frac{1}{2\sqrt{\rho^2 - r^2}}[(\rho + \sqrt{\rho^2 - r^2})^{m+1} - (\rho - \sqrt{\rho^2 - r^2})^{m+1}]$$

令 $D_m(\lambda)=0$，即可得到特征值。

为方便计，作变换 $\rho=r\cos\theta$，则

$$\sqrt{\rho^2 - r^2} = r\sqrt{\cos^2\theta - 1} = ir\sin\theta$$

(2-3-12)式变为

$$D_{N-1}(\lambda) = \frac{1}{2ir\sin\theta}[(r\cos\theta + ir\sin\theta)^N - (r\cos\theta - ir\sin\theta)^N]$$

由复变函数的知识可知

$$D_{N-1}(\lambda) = \frac{r^N}{2ir\sin\theta}(\cos N\theta + i\sin N\theta - \cos N\theta + i\sin N\theta)$$

$$= r^{N-1} \cdot \frac{\sin N\theta}{\sin\theta}$$

现有
$$D_{N-1}(\lambda)=0$$

则
$$\sin N\theta=0$$

即有
$$N\theta=(N-k)\pi, \qquad k=1,2,\cdots,N-1$$

$$\theta=\frac{N-k}{N}\pi$$

由
$$\rho=\frac{1}{2}(1-2r-\lambda)=r\cos\theta$$

有

$$\lambda_k= 1 - 2r(1 + \cos\theta) = 1 - 4r\cos^2\frac{\theta}{2} = 1 - 4r\cos^2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{k\pi}{2N}\right)$$

$$= 1 - 4r\sin^2\left(\frac{k\pi}{2N}\right) \qquad k = 1,2,\cdots,N-1$$

这就是矩阵 A 的 $N-1$ 个特征值。

由前面的讨论知，格式Ⅰ稳定的充要条件是

$$|\lambda_i| \leqslant 1 \qquad (i = 1,2,\cdots,N-1)$$

即有
$$\left|1-4r\sin^2\left(\frac{k\pi}{2N}\right)\right|\leqslant 1$$

由此不等式可以推出 r 应满足

$$0 \leqslant r \leqslant 0.5 \tag{2-3-14}$$

也就是说，当采用格式Ⅰ时，一定要按照(2-3-14)式的条件来选取步长，所以格式Ⅰ又称为条件稳定格式(步长选择受约束)。

2.3.4 格式Ⅱ的稳定性

由(2-2-5)式有

$$\begin{cases} Bu^n = u^{n-1} + f^n \\ u^0 = \varphi \end{cases}$$

误差 $\varepsilon^n=\tilde{u}^n-u^n$ 满足的方程是

$$\begin{cases} B\varepsilon^n = \varepsilon^{n-1} \\ \text{初始误差 } \varepsilon^0 \end{cases} \qquad n = 1,2,\cdots,M \tag{2-3-15}$$

比较矩阵 A 和矩阵 B

$$A = \begin{bmatrix} 1-2r & r & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ r & 1-2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 1-2r & r \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & r & 1-2r \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 1+2r & -r & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -r & 1+2r & -r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 1+2r & -r \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -r & 1+2r \end{bmatrix}$$

可见有

$$B = 2E - A$$

E 为单位矩阵。设 λ_i 和 μ_i 分别是矩阵 A 和 B 的特征值，则有

$$\mu_i = 2 - \lambda_i$$

即

$$\mu_i = 1 + 4r\sin^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right) \qquad i = 1,2,\cdots,N-1 \tag{2-3-16}$$

由(2-3-16)式可以看出，μ_i 相异且均大于零。故 B 的行列式

$$\det B = \prod_{i=1}^{N-1} \mu_i > 0$$

不为零。即矩阵 B 是非奇异的。所以 B 有逆矩阵 B^{-1}在，且其特征值是 B 的特征值 μ_i 的倒数。设 B^{-1}的特征值为 η_k，则

$$\begin{aligned} \eta_k &= \mu_k^{-1} \\ &= \left[1 + 4r\sin^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right)\right]^{-1} \end{aligned} \tag{2-3-17}$$

而误差方程可以改写为

$$\begin{cases} \varepsilon^n = B^{-1}\varepsilon^{n-1} = (B^{-1})^n\varepsilon^0 \\ \varepsilon^0 \text{ 为初始误差} \end{cases}$$

格式 I 稳定的充要条件是

$$\|B\|_2 \leqslant 1$$

由(2-3-17)式可见，r 为任何正值时，均有

$$|\eta_k| \leqslant 1 \qquad k = 1,2,\cdots,N-1$$

也就是说，是恒满足稳定性条件。所以又称格式 I 为无条件稳定格式。

2.3.5 格式Ⅲ的稳定性

由(2-2-6)式可得误差方程为

$$\begin{cases}(E+B)\varepsilon^{n+1}=(E+A)\varepsilon^n \\ \text{初始误差 } \varepsilon^0\end{cases} \tag{2-3-18}$$

注意到,$E+B$ 的特征值是 $1+\mu_i$ 相异且大于零。故其行列式 $\det(E+B)>0$,即 $E+B$ 有逆矩阵存在。可得

$$\begin{aligned}\varepsilon^{n+1} &= (E+B)^{-1}(E+A)\varepsilon^n \\ &= [(E+B)^{-1}(E+A)]^{n+1}\varepsilon^0 \\ &= H^{n+1}\varepsilon^0\end{aligned}$$

记矩阵 H 的特征值为 γ_i,即

$$\gamma_i=\frac{2-4r\sin^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right)}{2+4r\sin^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right)} \tag{2-3-19}$$

$$i=1,2,\cdots,N-1$$

因为 $r>0$,可见 r 为任何值时,均有

$$|\gamma_i|\leqslant 1$$

因此,格式Ⅲ也是无条件稳定的。

2.3.6 格式Ⅳ的稳定性

由两层形式(2-3-9)式

$$\begin{cases}\boldsymbol{W}^{n+1}=H\boldsymbol{W}^n+\boldsymbol{G}^n \\ \boldsymbol{W}^1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}^1 \\ \boldsymbol{v}^1\end{bmatrix}\end{cases} \tag{2-3-9}$$

相应误差方程为

$$\begin{cases}\varepsilon^{n+1}=H\varepsilon^n=(\boldsymbol{H})^n\varepsilon^1 \\ \varepsilon^1=\widetilde{\boldsymbol{w}}^1-\boldsymbol{W}^1\end{cases} \tag{2-3-20}$$

可见格式Ⅳ稳定的充要条件为

$$\|H\|\leqslant 1$$

现在求 H 的特征值 λ,特征方程

$$\begin{vmatrix}c-\lambda E & E \\ E & -\lambda E\end{vmatrix}=0$$

即
$$(\lambda^2-c\lambda-1)E=0 \tag{2-3-21}$$

由(2-2-7)式给定的系数矩阵 c 和格式Ⅰ的系数矩阵 A 作比较得

$$c=2(A-E)$$

由 A 的特征值立即可以得到 c 的特征值 ν_i

$$\nu_i=-8r\sin^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right) \quad i=1,2,\cdots,N-1$$

由于 c 为实对称矩阵，所以必存在相似变换 Q，将 c 化为对角矩阵，且对角元素为 ν_i，而且相似变换后，矩阵的特征值不变。对(2-3-21)式中的 c 作相似变换后得

$$\lambda^2 E - \lambda E \begin{bmatrix} \nu_1 & & & \\ & \nu_2 & & \\ & & \ddots & 0 \\ & 0 & & \ddots \\ & & & & \nu_{N-1} \end{bmatrix} - E = 0$$

$$\begin{vmatrix} \lambda^2 - \lambda\nu_1 - 1 & & & & \\ & \lambda^2 - \lambda\nu_1 - 1 & & 0 & \\ & & \ddots & & \\ 0 & & & \ddots & \\ & & & & \lambda^2 - \lambda\nu_{N-1} - 1 \end{vmatrix}$$

$$= \prod_{i=1}^{N-1}\left[\lambda^2 + 8\lambda\sin\left(\frac{i\pi}{2N}\right) - 1\right] = 0$$

则

$$\lambda^2 + 8r\sin^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right)\lambda - 1 = 0$$

得

$$\lambda_i = -4r\sin^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right) \pm \sqrt{16r^2\sin^4\left(\frac{i\pi}{2N}\right) + 1} \tag{2-3-22}$$

格式稳定的充要条件为特征值的最大绝对值小于等于 1。但现在恒有

$$\left| -4r\sin^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right) - \sqrt{16r^2\sin^4\left(\frac{i\pi}{2N}\right) + 1} \right| > 1$$

所以，格式Ⅳ是无条件不稳定的，称为完全不稳定格式。

§2.4 差分格式的收敛性

前面一节中简单介绍了差分方程的稳定性概念，并对一些差分格式进行了讨论。注意到差分方程的稳定性是一个时间进行性的概念，与此相关的，也同样体现格式内在性质的一个概念是收敛性问题。和稳定性不同的是，它是一个空间概念。也就是说，针对一个微分方程，它的差分解 u_j^n 当划分的网格无限加密时，在解域的任何确定地点上，它都收敛于精确解 $u(x_j, t_n)$。

稳定性和收敛性的定义都有多种表达方式。解决具体问题时，可根据所处理的对象来进行选择。

当步长 $h \to 0$、$\tau \to 0$ 时，在一定范数条件下，若差分方程的解 u_j^n 趋于微分方程的解 $u(j,n)$，则称此差分格式是收敛的。

2.4.1 格式Ⅰ的收敛性

由(2-1-8)式可知，微分方程的解应满足

$$\left.\begin{array}{l} u(j,n+1)=(1-2r)u(j,n)+ru(j+1,n)+ru(j-1,n)+\tau O(\tau+h^2) \\ u(j,0)=\varphi(jh) \\ u(0,n)=\mu_1(n\tau) \\ u(N,n)=\mu_2(n\tau) \end{array}\right\} \quad (2\text{-}4\text{-}1)$$

由(2-1-12)式可知，差分方程的解应满足

$$\left.\begin{array}{l} u_j^{n+1}=(1-2r)u_j^n+r(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n) \\ u_j^0=\varphi(jh) \\ u_0^n=\mu_1(n\tau) \\ u_N^n=\mu_2(n\tau) \end{array}\right\} \quad (2\text{-}4\text{-}2)$$

令

$$\rho_j^n=u(j,n)-u_j^n, \qquad \rho^n=[\rho_1^n,\rho_2^n,\cdots,\rho_{N-1}^n]^T$$

$$e_j^n=O(\tau+h^2), \qquad e^n=[e_1^n,e_2^n,\cdots,e_{N-1}^n]^T$$

由(2-4-1)，(2-4-2)式可得

$$\left.\begin{array}{l} \rho_j^{n+1}=(1-2r)\rho_j^n+r(\rho_{j+1}^n+\rho_{j-1}^n)+\tau e_j^n \\ n=0,1,2,\cdots,M-1; \quad j=1,2,\cdots,N-1 \\ \rho_j^0=0 \\ \rho_0^n=0 \\ \rho_N^n=0 \end{array}\right\} \quad (2\text{-}4\text{-}3)$$

写成向量形式为

$$\left.\begin{array}{l} \rho^{n+1}=A\rho^n+\tau e^n \\ \rho^0=0 \end{array} \quad n=0,1,\cdots,M-1\right\} \quad (2\text{-}4\text{-}4)$$

或

$$\begin{aligned} \rho^n &= A\rho^{n-1}+\tau e^{n-1}=A(A\rho^{n-2}+\tau e^{n-2})+\tau e^{n-1} \\ &= \tau[(A)^{n-1}e^0+(A)^{n-2}e^1+\cdots+Ae^{n-2}+e^{n-1}] \end{aligned} \quad (2\text{-}4\text{-}5)$$

取范数定义为

$$\|\rho^n\|_m=\max_j|\rho_j^n| \qquad j=1,2,\cdots,N-1$$

即取 ρ^n 的分量中最大绝对值作为 ρ^n 的范数。同样

$$\|e^n\|_m=\max_j|e_j^n|$$

而

$$|e_j^n|=|O(\tau+h^2)|$$

而 $O(\tau+h^2)$ 虽然对每一点来说，具体值不相同，但就其量级而言，都是相同的。这样，可以认为 e^n 的分量均相等(n 为任何值)。于是由(2-4-5)式有

$$\begin{aligned} \|\rho^n\|_m &= \|\tau[(A)^{(n-1)}e^0+(A)^{n-2}e^1+\cdots+Ae^{n-2}+e^{n-1}]\| \\ &\leqslant \tau(\|A\|_m^{n-1}+\cdots+\|A\|_m+1)\cdot O(\tau+h^2) \end{aligned} \quad (2\text{-}4\text{-}6)$$

上式中的不等式是利用了范数相容性的定义

$$\|Ae\|\leqslant\|A\|\cdot\|e\| \quad ,\|A^n\|\leqslant\|A\|^n$$

而得到的。

讨论：

(1) 若 $\|A\|_m>1$，当 $n\to\infty$ 时，则 $\|A\|_m^n\to\infty$，但 $\tau\to 0, h^2\to 0$，即有 $O(\tau+h^2)\to 0$，这样，$\|\rho^n\|_m$ 不一定趋于零，即不一定收敛。

(2) 若 $\|A\|_m=1$，则有

$$\|\rho^n\|_m \leqslant \tau \cdot n \cdot O(\tau + h^2) = T \cdot O(\tau + h^2)$$

(3) 若$\|A\|_m<1$,则

$$\tau(\|A\|^{n-1} + \cdots + \|A\| + 1) < T$$

所以,若$\|A\|_m\leqslant 1$,则有

$$\|\rho^n\|_m \leqslant TO(\tau + h^2)$$

既然$|\rho_j^n|$中最大值都符合上面不等式,当然所有的$|\rho_j^n|$均符合。所以有

$$|\rho_j^n| \leqslant TO(\tau + h^2) \tag{2-4-7}$$

即对于一切的n,j均成立,则

$$|\rho_j^n| = |u(j,n) - u_j^n| \underset{\substack{h\to 0\\ \tau\to 0}}{\to} 0$$

这样,当有$\|A\|_m\leqslant 1$时,格式Ⅰ是一致收敛的。

现在我们来求$\|A\|_m$,设A为$n\times n$阶矩阵,定义$\|A\|_m$为

$$\|A\|_m = \|A\|_\infty = \max\left(\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|, i = 1,\cdots,n\right)$$

而A对于格式Ⅰ是

$$A = \begin{bmatrix} 1-2r & r & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ r & 1-2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 1-2r & r \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & r & 1-2r \end{bmatrix}$$

现$\Sigma|a_{ij}|$有两种,即

$$|1-2r| + |r|$$

和

$$|r| + |1-2r| + |r|$$

显然,第二个大于第一个。故

$$\|A\|_m = |r| + |1-2r| + |r|$$

现要求

$$\|A\|_m \leqslant 1$$

而$r>0$,故有

$$2r + |1-2r| \leqslant 1$$

由上面不等式可知,当

$$0 < r \leqslant \frac{1}{2}$$

时,有$\|A\|_m\leqslant 1$。所以,若第一边值问题的解在区域$R(0\leqslant x\leqslant 1, 0\leqslant t\leqslant T)$内有连续偏导数$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$和$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$,且$0<r\leqslant\frac{1}{2}$,则格式Ⅰ一致收敛。注意,上面结论中,$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$和$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$连续的条件不能省略,不然,就不会有$O(h^2)$和$O(\tau)$项。

2.4.2 格式Ⅱ的收敛性

微分方程的解和差分方程的解之间的误差满足的方程为

$$\begin{cases} B\rho^{n+1} = \rho^n + \tau e^n \\ \rho^0 = 0 \end{cases} \qquad i = 0,1,\cdots,M-1 \tag{2-4-8}$$

其中 e^n 的分量为 $e_j^n = O(\tau + h^2)$。前面已经证明矩阵 B 有逆矩阵，故

$$\begin{aligned} \rho^{n+1} &= B^{-1}\rho^n + \tau B^{-1}e^n \\ &= B^{-1}(B^{-1}\rho^{n-1} + \tau B^{-1}e^{n-1}) + \tau B^{-1}e^n \\ &= \tau[(B^{-1})^{n+1}e^0 + (B^{-1})^n e + \cdots + (B^{-1})^2 e^{n-1} + B^{-1}e^n] \end{aligned}$$

取

$$\| e^n \| = \max_j |e_j^n| = O(\tau + h^2)$$

$$\begin{aligned} \| \rho^{n+1} \|_m &= \| \tau[(B^{-1})^{n+1}e^0 + \cdots + (B^{-1})^2 e^{n-1} + B^{-1}e^n] \| \\ &\leqslant \tau[\| B^{-1} \|_m^{n+1} + \cdots + \| B^{-1} \|_m]O(\tau + h^2) \end{aligned}$$

若

$$\| B^{-1} \|_m \leqslant 1$$

则

$$\| \rho^{n+1} \|_m \leqslant \tau(n+1)O(\tau + h^2)$$

$$\| \rho^n \|_m \leqslant \tau \cdot nO(\tau + h^2)$$

$$\| \rho^n \|_m \leqslant T \cdot O(\tau + h^2)$$

即

$$|\rho_j^n| \leqslant T \cdot O(\tau + h^2) \tag{2-4-9}$$

显然有

$$|\rho_j^n| \xrightarrow[\substack{\tau \to 0 \\ h \to 0}]{} 0$$

这和格式Ⅰ中的(2-4-7)式完全一样，当 r 为何值时，有 $\| B^{-1} \|_m \leqslant 1$。

前面已经得到，B^{-1}的特征值为

$$\eta_i = \frac{1}{1 + 4r\sin^2\left(\frac{i}{2N}\pi\right)} \qquad i = 1,2,\cdots,N-1$$

B^{-1}是实对称矩阵，可以通过相似变换得

$$B^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{1 + 4r\sin^2\left(\frac{1}{2N}\pi\right)} & & & \\ & \frac{1}{1 + 4r\sin^2\left(\frac{2}{2N}\pi\right)} & & \bigcirc \\ & \bigcirc & \ddots & \\ & & & \frac{1}{1 + 4r\sin^2\left(\frac{N-1}{2N}\pi\right)} \end{bmatrix}$$

上面矩阵中第一行的分量绝对值之和比所有其它行的分量绝对值之和大，即

$$\| B^{-1} \|_m = \left| \frac{1}{1 + 4r\sin^2\left(\frac{1}{2N}\pi\right)} \right|$$

可见无论 r 为何值时均有

$$\| B^{-1} \|_m = \left| \frac{1}{1 + 4r\sin^2\left(\frac{\pi}{2N}\right)} \right| \leqslant 1$$

这样就证得，若第一边值问题的解在域 $0\leqslant x\leqslant 1, 0\leqslant t\leqslant T$ 内有连续偏导数$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$、$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$，则 $r>0$ 为任何值时，格式 I 一致收敛。

2.4.3 格式Ⅳ的收敛性

由(2-2-9)式知

$$W^{n+1}=HW^n+G^n$$

$$W^1=\begin{bmatrix} u^1 \\ v^1 \end{bmatrix}$$

微分方程的解和差分方程的解的误差方程为

$$\begin{cases} \rho^{n+1} = H\rho^n + \tau e^n \\ \rho^1 = 0 \end{cases} \qquad n = 1,2,\cdots,M-1$$

$$e_j^n = O(\tau^2 + h^2)$$

同前面讨论的相类似

$$\begin{aligned} \rho^n &= H\rho^{n-1} + \tau e^{n-1} \\ &= \tau[(H)^{n-2}e^1 + \cdots + He^{n-2} + e^{n-1}] \end{aligned}$$

所以

$$\|\rho^n\|_m \leqslant \tau(\|H\|_m^{n-2} + \cdots + \|H\|_m + 1)O(\tau^2 + h^2)$$

若

$$\|H\|_m \leqslant 1$$

则有

$$\begin{aligned} \|\rho^n\|_m &\leqslant \tau(n-1))O(\tau^2+h^2) \\ &\leqslant TO(\tau^2+h^2) \end{aligned}$$

现

$$H = \begin{bmatrix} C & E \\ E & O \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4r & 2r & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 2r & -4r & 2r & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & & 0 & 0 & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & -4r & 2r & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 2r & -4r & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & & & & & & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \|H\|_m &= |2r| + |-4r| + |2r| + 1 \\ &= |8r| + 1 \geqslant 1 \end{aligned}$$

可见，当 $r>0$ 为任何值时，均有 $\|H\|_m>1$，这样，就得到格式Ⅳ是无条件不收敛。

§2.5 其它差分格式

前面介绍了一维热传导方程的一些差分格式，并且对这些格式的稳定性、收敛性等问题做了比较详细的讨论。下面再介绍一些一维热传导方程的其它差分格式。

2.5.1 半显式格式

前面已经给出，一维热传导方程的第一边值问题为

$$\left.\begin{aligned}&Lu=\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0 && 0<x<1,\ 0<t\leqslant T\\&u(x,0)=\varphi(x) && 0\leqslant x\leqslant 1\\&u(0,t)=\mu_1(t) && 0<t\leqslant T\\&u(1,t)=\mu_2(t) && 0<t\leqslant T\end{aligned}\right\}\quad(2\text{-}1\text{-}1)$$

将 $u(x,t)$ 在 (j,n) 点展开为

$$\frac{\partial u(j,n)}{\partial t}=\frac{u(j,n+1)-u(j,n)}{\tau}-\frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u(j,n)}{\partial t^2}+\cdots$$

对 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 在 (j,n) 点取中心差分

$$\frac{\partial^2 u(j,n)}{\partial x^2}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x}u(j,n)\right]$$

$$=\frac{\frac{\partial}{\partial x}u\left(j+\frac{1}{2},n\right)-\frac{\partial}{\partial x}u\left(j-\frac{1}{2},n\right)}{h}-\frac{h^2}{24}\frac{\partial^4 u(j,n)}{\partial x^4}+\cdots\cdots$$

而

$$\frac{\partial}{\partial x}u\left(j-\frac{1}{2},n\right)=\frac{\partial}{\partial x}u\left(j-\frac{1}{2},n+1\right)-\tau\frac{2}{\partial t}\left[\frac{\partial u\left(j-\frac{1}{2},n+1\right)}{\partial x}\right]$$

$$\frac{\partial}{\partial x}u\left(j+\frac{1}{2},n\right)=\frac{u(j+1,n)-u(j,n)}{h}-\frac{h^2}{24}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}+\cdots$$

代人(2-1-1)式可得到差分方程为

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}=\frac{1}{h^2}(u_{j-1}^{n+1}-u_j^{n+1}-u_j^n+u_{j+1}^n)$$

截断误差为

$$R=O\left(\frac{\tau}{h}+\tau+h^2\right)$$

令

$$r=\frac{\tau}{h^2}$$

可得

$$(1+r)u_j^{n+1}-ru_{j-1}^{n+1}=(1-r)u_j^n+ru_{j+1}^n \quad (2\text{-}5\text{-}1)$$

可以证明，该格式是一个无条件稳定格式。但是其截断误差却比显式格式差，因为在 $O\left(\frac{\tau}{h}+\tau+h^2\right)$ 中，τ/h 不一定是一个小量，所以采用该格式时应满足 $\tau=O(h)$。

这个格式，在计算 u_{j-1}^{n+1} 时，要用到上一次算出的 u_j^{n+1}，所以称其为半显式格式。见图 2-5-1。

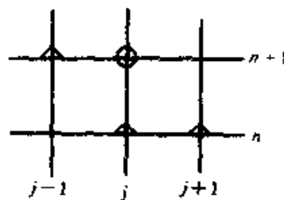


图 2-5-1 半显式格式示意图

2.5.2 隐—显式格式

从前面的讨论中可以看到，对应于一维热传导问题的差分格式有显式和隐式之分。它们各有优缺点。显式格式不用求解方程组，计算方便，在计算机上计算时，对机器的内存要求不高。但是，格式的稳定性条件受到限制。

隐式格式是无条件稳定的，但是，每计算一步都需要求解一个方程组。这就使得人们想到，是否可以交替采用这两类格式处理同一个问题。隐—显格式就是在这种想法下产生的。

以方程(2-1-1)为例。奇数层用隐式格式，偶数层用显式格式，有

格式 Ⅱ $$\frac{u_j^{2n+1}-u_j^{2n}}{\tau}=\frac{1}{h^2}(u_{j-1}^{2n+1}-2u_j^{2n+1}+u_{j+1}^{2n+1})$$

格式 Ⅰ $$\frac{u_j^{2n+2}-u_j^{2n+1}}{\tau}=\frac{1}{h^2}(u_{j-1}^{2n+1}-2u_j^{2n+1}+u_{j+1}^{2n+1})$$

或

$$\left.\begin{aligned}&(1+2r)u_j^{2n+1}-r(u_{j-1}^{2n+1}+u_{j+1}^{2n+1})=u_j^{2n}\\&u_j^{2n+2}=(1-2r)u_j^{2n+1}+r(u_{j+1}^{2n+1}+u_{j-1}^{2n+1})\end{aligned}\right\}\tag{2-5-2}$$

如图 2-5-2 所示。第一式的误差方程为

$$B\varepsilon^{2n+1}=\varepsilon^{2n}$$

第二式的误差方程为

$$\varepsilon^{2n+2}=A\varepsilon^{2n+1}$$

于是可得

$$\varepsilon^{2n+2}=AB^{-1}\varepsilon^{2n}$$

A、B^{-1}的特征值前面已经求出。AB^{-1}的特征值的最大绝对值为

$$\|AB^{-1}\|_2=\max_i\left|\frac{1-4r\sin^2\left(\frac{i}{2N}\pi\right)}{1+4r\sin^2\left(\frac{i}{2N}\pi\right)}\right|\qquad i=1,2,\cdots,N-1$$

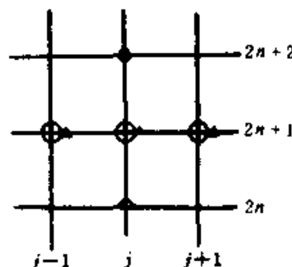


图 2-5-2 隐—显式格式示意图

由上式可见，$r>0$ 为任何值时，均有 $\|AB^{-1}\|_2<1$。即隐—显格式是无条件隐定的。而工作量则比隐式格式 Ⅱ 省了一半。

2.5.3 显—隐格式

和隐—显格式不同的是，它是在奇数层用显式，而偶数层用隐式格式。即

$$\frac{u_j^{2n+1}-u_j^{2n}}{\tau}=\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^{2n}-2u_j^{2n}+u_{j-1}^{2n})$$

$$\frac{u_j^{2n+2}-u_j^{2n+1}}{\tau}=\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^{2n+2}-2u_j^{2n+2}+u_{j-1}^{2n+2})$$

或

$$\left\{\begin{aligned}&u_j^{2n+1}=(1-2r)u_j^{2n}+r(u_{j+1}^{2n}+u_{j-1}^{2n})\\&(1+2r)u_j^{2n+2}-r(u_{j-1}^{2n+2}+u_{j+1}^{2n+2})=u_j^{2n+1}\end{aligned}\right.\tag{2-5-3}$$

如图 2-5-3 所示。两式相加得

$$(1+2r)u_j^{2n}-r(u_{j-1}^{2n+2}+u_{j+1}^{2n+2})=(1-2r)u_j^{2n}+r(u_{j+1}^{2n}+u_{j-1}^{2n})$$

这是一个步长为 2τ 的六点格式。虽然它也是隐式的，但其截断误差为 $R=O(4\tau^2+h^2)$，比格式 Ⅰ 精度高。而和格式 Ⅱ 相比，少解了一半方程组。可以证明，它也是无条件稳定的。

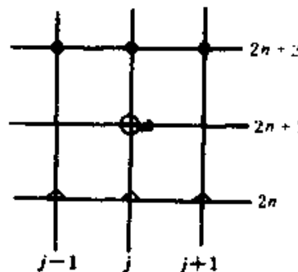


图 2-5-3 显—隐式格式示意图

2.5.4 格式Ⅳ(Richardson 格式)的改进

前面曾经给出了逼近于热传导方程的 Richardson 格式(即

格式Ⅳ)并证明了它是完全不稳定的。

Dufort，Frankel 在他们的工作中，对 Richardson 格式进行了修正，使之变为无条件稳定的三层显式格式。

原格式Ⅳ为

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\tau}=\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n)$$

Dufort 和 Frankel 将 u_j^n 改为 $\frac{1}{2}(u_j^{n+1}+u_j^{n-1})$，于是原格式Ⅳ改为(见图 2-5-4)

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\tau}=\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^n-u_j^{n+1}-u_j^{n-1}+u_{j-1}^n) \tag{2-5-4}$$

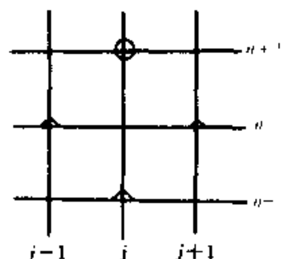


图 2-5-4　三层显式格式示意图

可以证明，当 $r>0$ 为任意常数时，格式都是稳定的。

现在来考察该格式的截断误差以及在什么样条件下差分方程逼近于微分方程。

由泰勒展开

$$u(j\pm1,n)=u(j,n)\pm h\frac{\partial u(j,n)}{\partial x}+\frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2u(j,n)}{\partial x^2}\pm\frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3u(j,n)}{\partial x^3}+\frac{h^4}{4!}\frac{\partial^4u(j,n)}{\partial x^4}+\cdots$$

$$u(j,n\pm1)=u(j,n)\pm\tau\frac{\partial u(j,n)}{\partial t}+\frac{\tau^2}{2!}\frac{\partial^2u(j,n)}{\partial t^2}\pm\frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3u(j,n)}{\partial t^3}+\frac{\tau^4}{4!}\frac{\partial^4u(j,n)}{\partial t^4}+\cdots$$

得

$$\begin{aligned}Lu&=\frac{\partial u(j,n)}{\partial t}-\frac{\partial^2u(j,n)}{\partial x^2}\\&=\frac{u(j,n+1)-u(j,n-1)}{2\tau}\\&\quad-\frac{1}{h^2}[u(j+1,n)-u(j,n+1)+u(j-1,n)-u(j,n-1)]\\&\quad-\frac{\tau^2}{h^2}\frac{\partial^2u(j,n)}{\partial t^2}+O(h^2+\tau^2+\frac{\tau^4}{h^2})\end{aligned} \tag{2-5-5}$$

若

$$r=\frac{\tau}{h^2}=\text{const}$$

则

$$\begin{aligned}R&=-r\tau\frac{\partial^2u}{\partial t^2}+O(h^2+\tau^2+\frac{\tau^4}{h^2})\\&=O(h^2+\tau)\end{aligned}$$

当 $h\to0,\tau\to0$ 时，差分方程逼近源方程。如果差分方程的空间步长和时间步长有约束关系

$$h=\tau^\alpha$$

其中 α 为一实数。当 $\tau\to0$ 时，差分方程趋近于源微分方程，则说差分方程和源方程是相容的。以后我们还要给出相容性的严格定义。

可见，当 $r=\tau/h^2=\text{const}$ 时，该格式是与方程(2-1-1)相容的。

若 $s=\tau/h=\text{const}$ 时，则

$$R=-s^2\frac{\partial^2u(j,n)}{\partial t^2}+O(h^2+\tau^2+\frac{\tau^4}{h^2})$$

$$= - s^2 \frac{\partial^2 u(j,n)}{\partial t^2} + O(h^2 + \tau^2 + \tau^2 s)$$

(2-5-5)式成为

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + s^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_j^n$$

$$= \frac{u(j,n+1) - u(j,n-1)}{2\tau} - \frac{1}{h^2}[u(j+1,n) - u(j,n+1)$$

$$- u(j,n-1) + u(j-1,n)] + O(h^2 + \tau^2) \qquad (2\text{-}5\text{-}6)$$

可见，此时当 $h \to 0$、$\tau \to 0$ 时，差分方程逼近于方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + s^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$$

这是一个抛物型方程，可见是不相容的。这样，我们就看到，差分方程的相容性是与步长比有关的。

2.5.5 有间断系数的抛物型方程

在爆轰学中要研究多种介质的热传导问题，热点起爆理论等常会遇到有间断系数的抛物型方程的问题。下面以一维问题为例来研究它的差分格式问题。

给出一维热传导方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) \qquad (2\text{-}5\text{-}7)$$

其中

$$k = a + cx + dx^2 + \cdots + hx^n + \cdots$$

是一个 x 的函数。且 k 在 $x = \xi$ 处间断。而 $u, k\dfrac{\partial u}{\partial x}$ 却是连续的。见图 2-5-5，令

$$\xi = x_j + \theta h, \qquad \theta < 1$$

差分格式为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = \frac{1}{h^2}[a_{j+\frac{1}{2}}(u_{j+1} - u_j) - a_{j-\frac{1}{2}}(u_j - u_{j-1})]^n \qquad (2\text{-}5\text{-}8)$$

式中 $a_{j+\frac{1}{2}}$ 是 k 的积分中值

$$a_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{h}\int_{x_j}^{x_{j+1}} k\mathrm{d}x$$

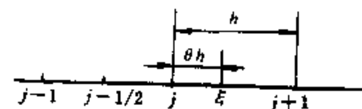


图 2-5-5 间断点位置

$$a_{j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{h}\int_{x_{j-1}}^{x_j} k\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{h}\int_{x_{j-1}}^{x_j} (a + cx + dx^2 + \cdots)\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{h}\left[ah + \frac{c}{2}(x_j^2 - x_{j-1}^2) + \frac{d}{3}(x_j^3 - x_{j-1}^3) + \cdots \right]$$

$$= a + \frac{c}{2}(x_j + x_{j-1}) + \frac{d}{12}[3(x_j^2 + 2x_j x_{j-1} + x_{j-1}^2)$$

$$+ x_j^2 - 2x_j x_{j-1} + x_{j-1}^2] + \cdots$$

下面来求差分格式在间断点处的截断误差。

令

$$u_+ = u(\xi + 0), \quad u_- = u(\xi - 0)$$

则

$$u_+ = u_-$$

$$k_+ u'_+ = k_- u'_-$$

在 ξ 点对 x 作泰勒展开有

$$u(x_{j+1},t) = u_+ + (1-\theta)hu'_+ + \frac{(1-\theta)^2h^2}{2}u''_+ + O(h^3) \tag{2-5-9}$$

$$u(x_j,t) = u_- - \theta hu'_- + \frac{1}{2}\theta^2h^2u''_- + O(h^3) \tag{2-5-10}$$

$$u(x_{j-1},t) = u_- - (1+\theta)hu'_- + \frac{(1+\theta)^2h^2}{2}u''_- + O(h^3) \tag{2-5-11}$$

$$\begin{aligned} k_{j-\frac{1}{2}} &= k_- - \left(\frac{1}{2} + \theta\right)hk'_- + O(h^2) \\ &= k_- + O(h) \end{aligned} \tag{2-5-12}$$

代入 $a_{j-\frac{1}{2}}$ 式得

$$a_{j-\frac{1}{2}} = k_- + O(h)$$

由(2-5-9)－(2-5-10)式有

$$\begin{aligned} u(x_{j+1},t) - u(x_j,t) &= (1-\theta)hu'_+ + \theta hu'_- + \frac{1}{2}(1-\theta)^2h^2u''_+ - \frac{1}{2}\theta^2h^2u''_- + O(h^3) \\ &= h\left[\frac{1-\theta}{k_+}k_+u'_+ + \frac{\theta}{k_-}k_-u'_-\right] + \frac{h^2}{2}[(1-\theta)^2u''_+ - \theta^2u''_-] + O(h^3) \\ &= hku'\left(\frac{1-\theta}{k_+} + \frac{\theta}{k_-}\right) + \frac{h^2}{2}[(1-\theta)^2u''_+ - \theta^2u''_-] + O(h^3) \end{aligned} \tag{2-5-13}$$

由(2-5-10)－(2-5-11)式有

$$u(x_j,t) - u(x_{j-1},t) = hu'_- - \frac{h^2}{2}(1+2\theta)u''_- + O(h^3)$$

将 $\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial u}{\partial x}\right)$ 在 ξ 点展开

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j &= (ku')'_j \\ &= (ku')'_- - \theta h(ku')''_- + O(h^2) \\ &= (ku')'_- + O(h) \end{aligned} \tag{2-5-14}$$

而

$$\begin{aligned} & a_{j-\frac{1}{2}}[u(x_j,t) - u(x_{j-1},t)] \\ &= \left[k_- - \left(\frac{1}{2}+\theta\right)hk'_- + O(h^2)\right]\left[hu'_- - \frac{h^2}{2}(1+2\theta)u''_- + O(h^3)\right] \\ &= k_-hu'_- - \frac{h^2}{2}k_-(1+2\theta)u'' - h^2\left(\frac{1}{2}+\theta\right)u'_-k'_- + O(h^3)] \end{aligned} \tag{2-5-15}$$

所以截断误差

$$\begin{aligned} R &= \frac{1}{h^2}\{a_{j+\frac{1}{2}}[u(x_{j+1},t) - u(x_j,t)] - a_{j-\frac{1}{2}}[u(x_j,t) - u(x_{j-1},t)]\} - (ku')'_j \\ &= \frac{1}{h}ku'\left[a_{j+\frac{1}{2}}\frac{(1-\theta)}{k_+} + \frac{\theta}{k_-}) - 1\right] + \frac{1}{2}a_{j+\frac{1}{2}}[(1-\theta)^2u''_+ - \theta^2u''_-] \\ &\quad + \left(\frac{1}{2}+\theta\right)k'_-u'_- + \frac{1}{2}(1+2\theta)k_-u''_- - (ku')'_- + O(h) \end{aligned} \tag{2-5-16}$$

其右端第二项以后的几项有

$$\left(\frac{1}{2}+\theta\right)k'\quad u'_- + \frac{1}{2}(1+2\theta)k_-\,u''_- - (ku')'_- = \left(\theta+\frac{1}{2}\right)(ku')'_- - (ku')'_-$$

$$= \left(\theta-\frac{1}{2}\right)(ku')'_- = O(1)$$

而右端第二项

$$\frac{1}{2}a_{j+\frac{1}{2}}[(1-\theta)^2u''_+ - \theta^2u''_-] = O(1)$$

因为

$$\Delta_\tau u^n = \frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}$$

的截断误差为$O(\tau)$。但上式右端第一项中有$1/h$,当$h\to 0$时,$R\to\infty$。因此要选择$a_{j+\frac{1}{2}}$,使

$$a_{j+\frac{1}{2}}\left(\frac{1-\theta}{k_+}+\frac{\theta}{k_-}\right)-1=0$$

则截断误差为$R=O(1)+O(\tau)$,这是在间断点附近的情况。对于连续区,$R=O(h^{\frac{3}{2}}+\tau^2)$。这里我们不再给出证明。

类似的,对于形如

$$c\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(R\frac{\partial u}{\partial x}\right)-qu+f \tag{2-5-10}$$

的抛物型方程,其中c、R、q、f均为x、t的函数。它的差分格式的截断误差同(2-5-7)式。

§2.6 二维抛物型方程的差分方法

前面几节中,介绍了一维热传导方程的一些差分解法,并对其中某些格式进行了稳定性和收敛性分析。但是在爆炸力学、流体动力学、传热学中更常遇到的是二维的抛物型方程。二维热传导方程第一边值条件的定解问题的提法为

$$\left.\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} & 0<x<1,0<y<1,0<t\leqslant T\\
u(x,y,0)=f(x,y) & 0\leqslant x\leqslant 1,0\leqslant y\leqslant 1\\
\left.\begin{array}{l}u(0,y,t)=\psi_1(y,t)\\ u(1,y,t)=\psi_2(y,t)\end{array}\right\} & 0\leqslant y\leqslant 1,0\leqslant t\leqslant T\\
\left.\begin{array}{l}u(x,0,t)=\varphi_1(x,t)\\ u(x,1,t)=\varphi_2(x,t)\end{array}\right\} & 0\leqslant x\leqslant 1,0<t\leqslant T
\end{array}\right\} \tag{2-6-1}$$

前面几节所讨论的差分格式原则上可用于多维情况,但还会出现一些新问题。如将显式格式Ⅰ用于(2-6-1)式则有

$$\Delta_t u_{i,j}^n = \delta_x^2 u_{i,j}^n + \delta_y^2 u_{i,j}^n$$

即

$$\frac{u_{i,j}^{n+1}-u_{i,j}^n}{\Delta t}=\frac{u_{i+1,j}^n-2u_{i,j}^n+u_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2}+\frac{u_{i,j+1}^n-2u_{i,j}^n+u_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} \tag{2-6-2}$$

所选取的网格为

$$x_i = i\Delta x \qquad i = 0,1,2,\cdots,N$$
$$y_j = j\Delta y \qquad j = 0,1,2,\cdots,P$$
$$t_n = n\Delta t \qquad n = 0,1,2,\cdots,M$$

其中 Δt、Δx 和 Δy 分别是 t 方向、x 方向和 y 方向的步长。此时稳定性条件是

$$\Delta t\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right) \leqslant \frac{1}{2}$$

如果取 $\Delta x = \Delta y = h$，则有

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leqslant \frac{1}{4} = \frac{1}{2 \times 2}$$

可以证明，对于 n 维热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \cdots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2} \qquad (n \geqslant 1 \text{ 为正整数})$$

的差分格式 I 的稳定性条件为

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leqslant \frac{1}{2n}$$

因此当维数越高，要求时间步长越小，从而计算工作量越大。

若用隐式格式 Ⅱ，则(2-6-1)式的差分格式为

$$\nabla_t u_{i,j}^n = \delta_x^2 u_{i,j}^n + \delta_y^2 u_{i,j}^n$$

即
$$\frac{u_{i,j}^n - u_{i,j}^{n-1}}{\Delta t} = \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + 2u_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} \tag{2-6-3}$$

上式中，待求的 n 层上某一点 (i,j) 有 5 个未知量。即每一个时间层次上要解一个五对角的 $(N-1)\times(p-1)$ 个未知量的线性代数方程组，工作量很大。我们知道，对于系数矩阵为三对角矩阵的线性方程组，用"追赶法"可以直接得到方程组的解，而无需采用迭代，所以在计算机上是相当便利的。而五对角矩阵的线性方程组则不行，求解方程组时一般要用迭代的方法，解线性方程组也可以采用消元法，但是当方程组的数目很大时，消元法引起的舍入误差很难控制，而对一个计算机而言，字长总是预先给定的，不可能无限制增大，所以应当从经济的观点和节省计算机内存的角度来选择差分格式。

下面我们来介绍几种交替方向的隐式差分格式，这些格式都是基于以上想法的基础上发展的。

2.6.1 P—R(Peaceman-Rachford)方法(1955)

该方法是一个两步方法，第一步 x 方向用隐式格式，y 方向用显式格式，第二步则在 y 方向用隐式格式，x 方向用显式格式，这样使得每一步所解的方程组都可以用追赶法求解。两步格式如下

$$\begin{aligned}
\frac{u_{i,j}^{2n+1} - u_{i,j}^{2n}}{\Delta t} &= \frac{u_{i+1,j}^{2n+1} - 2u_{i,j}^{2n-1} + u_{i-1,j}^{2n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^{2n} - 2u_{i,j}^{2n} + u_{i,j-1}^{2n}}{(\Delta y)^2} \\
\frac{u_{i,j}^{2n+2} - u_{i,j}^{2n+1}}{\Delta t} &= \frac{u_{i-1,j}^{2n+1} - 2u_{i,j}^{2n+1} + u_{i-1,j}^{2n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^{2n+2} - 2u_{i,j}^{2n+2} + u_{i,j-1}^{2n+2}}{(\Delta y)^2}
\end{aligned} \tag{2-6-4}$$

可以证明，该格式是无条件稳定的，具有全二阶精度。

2.6.2 Douglas－Rachford 方法(1956)

$$
\begin{aligned}
&\frac{u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}-u_{i,j}^{n}}{\Delta t}=\frac{u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}}-2u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}+u_{i-1,j}^{n+1}}{(\Delta x)^{2}}+\frac{u_{i,j+1}^{n}-2u_{i,j}^{n}+u_{i,j-1}^{n}}{(\Delta y)^{2}}\\
&\frac{u_{i,j}^{n+1}-u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t}=\frac{u_{i+1,j}^{n+1}-2u_{i,j}^{n+1}+u_{i-1,j}^{n+1}}{(\Delta x)^{2}}-\frac{u_{i,j+1}^{n}-2u_{i,j}^{n}+u_{i,j-1}^{n}}{(\Delta y)^{2}}
\end{aligned}
\tag{2-6-5}
$$

在这个差分格式中，第 $n+(1/2)$ 层是一个过渡层。通过第一式计算过渡层，然后利用第二式计算 $n+1$ 层上的值，此时需要用到沿 y 方向第 n 层上的值。

这种差分格式是无条件稳定格式，具有全二阶精度，而且可以推广到三维或更高维的情形，而 P－R 方法则不能够。

§2.7 差分格式定性分析的预备知识

在前而以一维和二维热传导方程为例，介绍了一些抛物型方程的差分格式，并对这些格式的可靠性一例如稳定性和收敛性问题做了一些分析。对于下而第三章所要讨论的双曲型方程，还有耗散性和色散性的问题。在做这些分析时，需用到一些矩阵理论，如向量和矩阵的范数等概念。在讨论含有间断点(双曲型方程中常出现此种情况)的微分方程的差分格式时，常常需要在泛函分析中的一些特定空间(例如 L_2 空间)中去讨论。另外，为了方便起见又引入了一些算子。所以在这里有必要把这些预备知识介绍一下。

2.7.1 向量和矩阵的范数

设 a、b 是任意的实数，我们常用 $|a|$ 及 $|a-b|$ 来衡量 a 的大小及 a 与 b 相差的大小。为了衡量一个向量的大小及它们差的大小，也应该构造适当的概念来反映它们，这就是所谓的向量范数。关子矩阵也有类似的情况，这就产生了矩阵范数的概念。

一、向量范数

范数是定义在线性空间上的一个非负实值函数。如果 V 是数域 K 的一个线性空间，$\boldsymbol{x}\in V$ 是任意一个向量，$\boldsymbol{x}$ 按某种法则对应于一个非负实数 $\|\boldsymbol{x}\|$，这个实数满足下列三个条件：

(1) 当 $\boldsymbol{x}\neq 0$ 时，$\|\boldsymbol{x}\|>0$，当 $\boldsymbol{x}=0$ 时，$\|\boldsymbol{x}\|=0$；

(2) 对于任意 $\alpha\in K$，有 $\|\alpha\boldsymbol{x}\|=|\alpha|\,\|\boldsymbol{x}\|$；

(3) 对于任意向量 $\|\boldsymbol{x}\|$、$\|\boldsymbol{y}\|\in V$，成立

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$$

这样的函数 $\|\boldsymbol{x}\|$ 称为 $\boldsymbol{x}$ 的范数(或模)。

最常见的向量范数有：

$$\|\boldsymbol{x}\|_1=\sum_{i=1}^{n}|x_i|$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_2=\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty=\max_i|x_i|$$

二种范数 $\|\boldsymbol{x}\|_1$ 和 $\|\boldsymbol{x}\|_2$ 可以统一地写成如下形式

$$\| \boldsymbol{x} \|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \qquad 1 \leqslant p < \infty$$

它对于任意大于 1 的实数 p 都是满足范数定义的三个条件的。这一点很容易证明。

二、矩阵的范数

一个 $n\times m$ 阶的矩阵，可以看作是 $n\times m$ 维向量，因此可以按向量的办法来定义矩阵范数。但是矩阵和矩阵之间还有乘法运算，因此要注意到两者的差别。对于 $n\times n$ 的矩阵 A，定义矩阵范数如下：

在 $n\times n$ 方阵的全体构成的集合 M 上，定义一个非负的实数 $\| A \|$，如果对于任意 A、$B\in M$，$\| A \|$ 是 A 的一个函数，如果它具有如下性质：

(1) 非负性。$A\neq 0$ 时，$\| A \| > 0$，$A=0$ 时，$\| A \| = 0$；

(2) 齐次性。对任常数 $a\in k$（k 为一数域），有

$$\| aA \| = |a| \, \| A \|$$

(3) 三角不等式成立

$$\| A + B \| \leqslant \| A \| + \| B \|$$

(4) 相容性

$$\| AB \| \leqslant \| A \| \, \| B \|$$

则称 $\| A \|$ 为矩阵 A 的范数（或模）。

和向量的情况一样，矩阵可以有各种各样的范数。在许多情况下，矩阵的范数常和向量的范数同时使用，而矩阵经常是作为两个线性空间的线性映射出现的。因此要考虑一些矩阵范数和向量范数之间的联系。

定义：对于任意的 $n\times n$ 阶矩阵 A 和 n 维实向量空间 Rn 中的任意向量 $\boldsymbol{x}$，取的向量范数 $\| \boldsymbol{x} \|$ 和矩阵范数 $\| A \|$ 满足不等式

$$\| A\boldsymbol{x} \| \leqslant \| A \| \, \| \boldsymbol{x} \|$$

则称上述的矩阵范数与向量范数是相容的，并称这样的矩阵范数为该向量的从属范数。

现在引进矩阵的范数。使得它分别从属于前述三种向量范数。记 $n\times n$ 阶矩阵为

$$A = (a_{ij})$$

(1) $\| \boldsymbol{x} \|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$，从属于这个向量范数的矩阵范数是

$$\| \boldsymbol{A} \|_1 = \max_k \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}|$$

(2) $\| \boldsymbol{x} \|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$，从属于这种向量范数的矩阵范数为

$$\| \mathrm{A} \|_2 = \sqrt{\lambda_1}$$

其中 λ_1 是矩阵 A^TA 的绝对值最大的特征值。

(3) $\| \boldsymbol{x} \|_\infty = \max_i |x_i|$，从属于这种向量范数的矩阵范数为

$$\| \boldsymbol{A} \|_\infty = \max_i \sum_{k=1}^{n} (a_{ik})$$

关于它们的证明是不难的，可以从线性代数的书籍中找到。

2.7.2 谱半径、谱范数和 F 范数

有时，还会碰到一个与矩阵范数有关的名词，即所谓的谱半径的概念。

定义：矩阵 $A=(a_{ij})$ 的特征值的绝对值之最大值，叫做 A 的谱半径。用 $\rho(A)$ 表示。

定理：对于向量范数 $\| \quad \|_p (p=1,2,\infty)$，都有

$$\rho(A) \leqslant \| A \|_p$$

证明：

取 A 的任一特征值 λ 以及与 λ 相应的标准化的特征向量 Z'，即 $\| Z' \|_p=1$。于是

$$\| A \|_p = \sup \| AZ \|_p \geqslant \| AZ \|_p = \| \lambda Z' \|_p$$
$$= |\lambda| \| Z' \|_p = |\lambda|$$

因为 λ 是 A 的任一特征值，故上式得证。

对于 $\| \cdot \|_2$ 来说，不等式

$$\| A \|_2 \geqslant \rho(A)$$

在 A 为实对称情况下取等号。此时有

$$\begin{aligned} \| A \|_2^2 &= \rho(A^T A) \\ &= \rho(A^2) \\ &= [\rho(A)]^2 \end{aligned}$$

由于 $\| A \|_2=[\rho(A^T A)]^{1/2}$，所以 $\| A \|_2$ 又常记作 $\| A \|_{sp}$，并称为谱范数。

我们以后还会用到一种范数叫 Forbenius 范数（简称 F 范数），用 $\| \cdot \|_F$ 表示，例如

$$\| A \|_F = \left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2 \right)^{1/2}$$

这个范数很容易计算，它满足矩阵范数的前 4 条规定。还具有性质

$$\| A \|_F \geqslant \| A \|_2$$

这样，它也满足与向量范数 $\| \cdot \|_2$ 相容的规定

$$\| AX \|_2 \leqslant \| A \|_F \| X \|_2$$

2.7.3 L_2 空间

若函数在所研究的区域内不是处处连续的，而是有有限处的间断，如双曲型方程中出现的冲击波间断，波在多种介质中的传播，多介质热传导问题等，都属于这类情况。这时候，需要在 L_2 空间中进行讨论。简单地说，L_2 空间是一个平方可积的函数空间

$$\int_{R_d} |u(\boldsymbol{x})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} < \infty$$

$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_d)$ 为 d 维向量。

下面介绍一些 L_2 空间的概念。

一、内积

设 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}$ 是依赖于 $x_1,x_2,\cdots,x_d$ 的 p 维向量函数，且 $\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{v} \in L_2$，则内积

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) &= \int_{R_d} \boldsymbol{u}^* \boldsymbol{v} \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=1}^{p} \bar{u}_j \cdot v_j \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_d \end{aligned}$$

其中，$\boldsymbol{u}^*$ 是 $\boldsymbol{u}$ 的转置共轭向量，即

$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_p \end{bmatrix}, \quad v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ v_p \end{bmatrix}$$

$$u^* = (\bar{u}_1, \bar{u}_2, \cdots, \bar{u}_p)$$

二、范数

函数 u 的范数为

$$\| u \| = (u, u)^{\frac{1}{2}}$$

若采用内积的如下形式

$$u, v = u \cdot v$$

则有

若 u 为实函数，则 $\| u \|^2 = |u|^2$。

若 u 为复函数，则 $\| u \|^2$ = 实部平方＋虚部平方。

若 u 为向量函数，则 $\| u \|^2$ = 分量平方和。或

$$\| u \| = \left(\int_{R_d} u^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

2.7.4 Fourier 级数

在以后的分析中，还会遇到 Fourier 级数，尤其是多元函数的 Fourier 级数分析问题，为方便计，在这里做一简单的介绍。

设 $u(x)$ 是 x 的周期函数，其中 x 为一个 d 维向量 $(x_1, x_2, \cdots, x_d)^T$（这样，$u(x)$ 也可以视为一个 n 元函数），其周期为 $(l_1, l_2, \cdots, l_d)$，并且在 $x_j \in [0, l_j]$，$j = 1, 2, \cdots, d$ 上满足 Dirichlet 条件，则 $u(x)$ 可以展成 Fourier 级数：

$$u(x) = (l_1, l_2, \cdots, l_d)^{\frac{1}{2}} \sum_{k \in \mathscr{L}} \hat{u}(k) e^{-ikx}$$

这里，　$k = (k_1, k_2, \cdots, k_m, \cdots, k_d)$，$\mathscr{L}$ 是 k 的离散集合，而

$$k_m = \frac{2\pi\omega_m}{l_m}$$

式中 $\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_m, \cdots, \omega_d$ 取遍 $0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm\infty$ 值。

$$kx = \sum_{j=1}^{d} k_j x_j = k_1 x_1 + k_2 x_2 + \cdots + k_j x_j + \cdots + k_d x_d$$

Fourier 系数 $\hat{u}(k)$ 由下式给出

$$\hat{u}(k) = (l_1 l_2 \cdots l_d)^{-\frac{1}{2}} \int_0^l u(x) e^{-ikx} dx$$

例：若 $d = 2$，则 k 有 2 个

$$k_1 = \frac{2\pi\omega_1}{l_1}$$

$$k_2 = \frac{2\pi w_2}{l_2}$$

$$u(x_1,x_2) = \frac{1}{l_1 l_2} \sum_{k \in I} \int_0^{l_1}\int_0^{l_2} u(x_1,x_2) e^{-i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} dx_1 dx_2 e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)}$$

将$\sum$号内的各项可看作k_1, k_2的函数，或看作w_1, w_2的函数，上式可以写成

$$u(x_1,x_2) = \frac{1}{l_1 l_2} \sum_{k \in \mathscr{I}} G(w_1, w_2)$$

展开有

$$\begin{aligned} u(x_1,x_2) = \frac{1}{l_1 l_2}[& G(0,0) + G(0,1) + G(0,-1) + \cdots + G(0,\infty) \\ & + G(0,-\infty) + G(1,0) + G(1,1) + G(1,-1) + \cdots + G(1,\infty) \\ & + G(1,-\infty) + G(-1,0) + G(-1,1) + G(-1,-1) + \cdots \\ & + G(-1,\infty) + G(-1,-\infty) + \cdots + G(\infty,0) + G(\infty,1) \\ & + \cdots + G(\infty,\infty) + G(\infty,-\infty) + G(-\infty,0) + G(-\infty,1) \\ & + G(-\infty,-1) + \cdots + G(-\infty,\infty) + G(-\infty,-\infty)] \end{aligned}$$

若$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$是非周期函数，则要用 Fourier 变换。设$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$在$d$维空间$R_d$域内平方可积，则

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} \int_{R_d} \hat{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{k}) e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} d\boldsymbol{k}$$

2.7.5 偏微分方程组的初值问题及其适定性

对于偏微分方程组的定解问题的提法，可以分为初值问题、边值问题和初边值问题（也称混合问题）。初、边值条件称为定解条件。

一般说来，一个物理现象如果是确定存在的话，那么正确地描述该物理现象的定解问题应该是存在而且唯一的。

对于一个实际的物理问题来说，其定解条件中的函数值常常是由实验测定或者由经验给出的，因此必然存在误差，使得定解问题的解也有误差。如果定解条件的误差引起定解问题的解的误差是相当的，允许的，最好是缩小的，则称定解问题是稳定的，或者说解连续依赖于定解条件。这样的定解问题才有意义。如果定解条件的误差在解中被“放大”，产生不可允许的大误差，使得解失去真实性，那末该定解问题就失去意义了。

如果一个定解问题的解存在、唯一、而且稳定，则说定解问题的提法是适定的。

下面以微分方程的初值问题来简单介绍一下方程的适定性问题。

设有一微分方程的初值问题

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + P\boldsymbol{u} = 0 \qquad \boldsymbol{x} \in R_d, 0 < t \leqslant T \tag{2-7-1}$$

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)|_{t=0} = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) \qquad \boldsymbol{x} \in R_d \tag{2-7-2}$$

其中
$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_d)^T$$
$$\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \cdots, u_p)^T$$

分别为d维和p维向量；而$p = p(\boldsymbol{x}, t, D)$是$m$阶微分算子；$m$为方程阶数；$D = \frac{\partial}{\partial x}$。若$p$与$t$无关，则有

$$P = P(\boldsymbol{x}, D)$$

$$\begin{aligned} P\boldsymbol{u} &= \sum_{|\nu|\leqslant m} A_\nu(x) D_1^{\nu_1} \cdot D^{\nu_2} \cdots D_d^{\nu_d} \cdot \boldsymbol{u} \\ &= \sum_{|\nu|\leqslant m} A_\nu(x) \frac{\partial^{|\nu|}}{\partial x_1^{\nu_1} \cdots \partial x_d^{\nu_d}} \boldsymbol{u} \end{aligned} \tag{2-7-3}$$

这里 ν 是多重附标，$\nu=(\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_d)$，$\nu_1,\cdots,\nu_d$ 为非负整数(包括零)

$$|\nu| = \sum_{i=1}^{d} \nu_i$$

式中，| |并非是绝对值号。A_γ 是 $p\times p$ 阶方阵。

若 $p=2,m=3,d=2$，则

$$\nu_i = (0,1,2) \qquad i = 1,2$$

(2-7-1)式可以写成

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} &= -\sum_{\nu|\leqslant 3} A_\nu \frac{\partial^{\nu|}}{\partial x_1^{\nu_1}\partial x_2^{\nu_2}} \begin{bmatrix} u_1 \\ u^2 \end{bmatrix} \\ &= (A_{0,0} + A_{1,0}\frac{\partial}{\partial x_1} + A_{0,1}\frac{\partial}{\partial x_2} + A_{1,1}\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} \\ &\quad + A_{2,0}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + A_{0,2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + A_{1,2}\frac{\partial^3}{\partial x_1 \partial x_2^2} \\ &\quad + A_{2,1}\frac{\partial^3}{\partial x_1^2 \partial x_2} + A_{3,0}\frac{\partial^3}{\partial x_1^3} + A_{0,3}\frac{\partial^3}{\partial x_2^3}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

若 $m=1,d=1$，则 $\nu=(0,1)$。因为 $m=1$，故 Σ 中仅有两项。

$$P\boldsymbol{u} = A_1 \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x} + A_0 \boldsymbol{u}$$

现在仅考虑齐次情况，因此忽略掉不含偏导数的 A_0 项和上式中的 A_{00}项，则(2-7-1)式可以写成

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A\frac{\partial u}{\partial t} = 0 \tag{2-7-4}$$

式

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pp} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_p \end{bmatrix} = 0$$

若 A 的特征方程的特征值都是实数，且有完备的特征向量系，则(2-7-4)式为双曲型方程组。若 A 中无一实根，则(2-7-4)是椭圆型方程组。

定义一个解算子 $E(t)$，$E(t)$作用于初值 $\boldsymbol{v}(x)$，即得到 t 时刻的 $\boldsymbol{v}(x,t)$。即

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}(x,t) &= E(t)\boldsymbol{v}(x) \\ \boldsymbol{u}(x,0) &= \boldsymbol{v}(x) \end{aligned} \tag{2-7-5}$$

这样初值问题的适定性可以这样来表示：

(1)唯一性：对于$\forall\ \boldsymbol{v}(x)\in L_2$，在区间 $0\leqslant t\leqslant T$ 存在一个与 t 无关的常数 k，使得

$$\| \boldsymbol{u}(x,t) \| = \| E(t)\boldsymbol{v}(x) \| \leqslant k \| \boldsymbol{v}(x) \| \tag{2-7-6}$$

一致成立，则说该初值问题的解是唯一的。

(2)稳定性：稳定性的含义是定解条件（此时为初始条件）的微小变化只引起解在整个定义域中的微小变化。设初始条件由 $\boldsymbol{v}_1$ 变到 $\boldsymbol{v}_2$，若 $|\boldsymbol{v}_2-\boldsymbol{v}_1|$ 很小，则其解 $|\boldsymbol{u}_2-\boldsymbol{u}_1|$ 也很小，就是说

$$\boldsymbol{u}_2 - \boldsymbol{u}_1 = E(t)(\boldsymbol{v}_2 - \boldsymbol{v}_1)$$

$$\begin{aligned} \| \boldsymbol{u}_2 - \boldsymbol{u}_1 \| &= \| E(t)(\boldsymbol{v}_2 - \boldsymbol{v}_1) \| \\ &\leqslant \| E(t) \| \, \| (\boldsymbol{v}_2 - \boldsymbol{v}_1) \| \end{aligned}$$

若 $E(t)$ 一致有界（或称均匀有界），即存在一个与 t 无关的值 k，且

$$\| E(t) \| \leqslant k$$

则有

$$\| \boldsymbol{u}_2-\boldsymbol{u}_1 \| \leqslant k \| (\boldsymbol{v}_2-\boldsymbol{v}_1) \|$$

此时，称该初值问题是稳定的。或者说，解连续依赖于初始条件。

在以上讨论中，我们认为定解问题的解已经存在了。

微分方程的定解问题的适定性不是本书讨论的对象，所以今后我们总是认为定解问题的本身是适定的，而只讨论这些问题的离散化方程—差分方程的适定性。

2.7.6 用算子表示差分方程

首先介绍位移算子。

$$T^{\beta} = T^{(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_d)}$$

$$\boldsymbol{x} = (x_1,x_2,\cdots,x_d)$$

$$\Delta x = (\Delta x_1,\Delta x_2,\cdots,\Delta x_d)$$

T^{β} 作用于 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ 可以写作

$$T^{\beta}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}(x_1 + \beta_1\Delta x_1, x_2 + \beta_2\Delta x_2, \cdots, x_d + \beta_d\Delta x_d) \tag{2-7-7}$$

例 1：若 $d=1$，则有

$$T^0 u_j^n = u_j^n$$

$$T^1 u_j^n = u_{j+1}^n$$

$$T^{-1} u_j^n = u_{j-1}^n$$

对于微分方程(2-7-1)式，若将 $0\leqslant t\leqslant T$ 分为 M 等分，$\Delta t=T/M$，将整个空间 R_d 用

$$x_i=j_i\Delta x_i \qquad j_i=0,\pm1,\pm2\cdots$$

$$i=1,2,\cdots,d$$

划分为网格，则差分方程为

$$B_1\boldsymbol{u}^{n+1} = B_0\boldsymbol{u}^n$$

$$\boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{v} \tag{2-7-8}$$

式中 $\boldsymbol{u}^{n+1}$、$\boldsymbol{u}^n$ 和 $\boldsymbol{u}^0$ 是定义在网格结点上的函数。B_0，B_1 是依赖于 $\boldsymbol{x}$、Δt、$\Delta \boldsymbol{x}$ 的差分算子。

$$B_1 = \sum_{\beta\in N_1} B_1^{\beta} \cdot T^{\beta}$$

$$B_0 = \sum_{\beta\in N_0} B_0^{\beta} T^{\beta}$$

B_0^{β}，B_1^{β} 均为 $p\times p$ 阶矩阵。

$$\beta=(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_d)$$

N_0,N_1 为 $\beta=(0,0,0,\cdots,0)$附近的一个有限集合。

如果当 $\Delta t\to 0$ 时，Δx 也以一定方式趋于零，即

$$\begin{aligned}\Delta x_1&=g_1(\Delta t)\\ \Delta x_2&=g_2(\Delta t)\\ &\vdots\\ \Delta x_d&=g_d(\Delta t)\end{aligned}\tag{2-7-9}$$

则 B_0,B_1 依赖于 x 和 Δt。

例 2：一维热传导方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\sigma\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

式中 σ 为热传导系数。

差分方程为

$$\Delta_t u_j^n=\frac{\sigma}{2}(\delta_x^2 u_j^{n+1}+\delta_x^2 u_j^n)$$

令

$$r=\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

上式可以写成

$$-\frac{\sigma r}{2}u_{j+1}^{n+1}+(1+\sigma r)u_j^{n+1}-\frac{\sigma r}{2}u_{j-1}^{n+1}$$

$$=\frac{\sigma r}{2}u_{j+1}^n+(1-\sigma r)u_j^{n+1}+\frac{\sigma r}{2}u_{j-1}^n$$

用算子表示为

$$B_1^1T^1u_j^{n+1}+B_1^0T^0u_j^{n+1}-B_1^{-1}T^{-1}u_j^{n+1}$$

$$=B_0^1T^1u_j^n+B_0^0T^0u_j^n+B_0^{-1}T^{-1}u_j^n$$

即

$$(B_1^1T^1+B_1^0T^0+B_1^{-1}T^{-1})u_j^{n+1}=(B_0^1T^1+B_0^0T^0+B_0^{-1}T^{-1})u_j^n$$

可写为

$$B_1u_j^{n+1}=B_0u_j^n$$

此时，

$$N_1=(1,0,-1)\quad,\quad N_0=(1,0,-1)$$

若 $B_1=1$，则为显式格式。若 $B_1\neq 1$，则是隐式格式。

例 3：一维波动方程(双曲型方程)

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial v}{\partial x}\\[2mm] \dfrac{\partial v}{\partial t}=\dfrac{\partial u}{\partial x}\end{cases}$$

其差分格式为

$$\Delta_t u_j^n=\delta_x v_j^n$$

$$\nabla_t v_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}=\delta_x u_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$$

令 $s=\Delta t/\Delta x$ 得

$$u_j^{n+1} = u_j^n + s\left(v_{j+\frac{1}{2}}^n - v_{j-\frac{1}{2}}^n\right)$$

$$-su_{j+1}^{n+1} + su_j^{n+1} + v_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} = v_{j+\frac{1}{2}}^n$$

用矩阵写出就是

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -s & 0 \end{bmatrix} T^1 \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_j^{n+1} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} T^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_j^{n+1} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ s & 0 \end{bmatrix} T^0 \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_j^{n+1}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & s \\ 0 & 1 \end{bmatrix} T^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_j^n + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} T^0 \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_j^n + \begin{bmatrix} 0 & -s \\ 0 & 0 \end{bmatrix} T^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_j^n$$

改写成

$$\left(B_1^1 T^1 + B_1^{\frac{1}{2}} T^{\frac{1}{2}} + B_1^0 T^0\right) \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_j^{n+1} = \left(B_0^{\frac{1}{2}} T^{\frac{1}{2}} + B_0^0 T^0 + B_0^{-\frac{1}{2}} T^{-\frac{1}{2}}\right) \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_j^n$$

令

$$\boldsymbol{u} = (u, v)^T$$

$$B_1 = B_1^1 T^1 + B_1^{\frac{1}{2}} T^{\frac{1}{2}} + B_1^0 T^0$$

$$B_0 = B_0^{\frac{1}{2}} T^{\frac{1}{2}} + B_0^0 T^0 + B_0^{-\frac{1}{2}} T^{-\frac{1}{2}}$$

则上式可以写为

$$B_1 \boldsymbol{u}_j^{n+1} = B_0 \boldsymbol{u}_j^n$$

若 B_1 有逆算子 $(B_1)^{-1}$，(2-7-8)式可以写成

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = (B_1)^{-1} B_0 \boldsymbol{u}^n$$

$$= C(x, \Delta x, \Delta t)\boldsymbol{u}^n$$

若有(2-7-9)式的关系 $\Delta x_i = g_i(\Delta t)$，则

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = C(x, \Delta t)\boldsymbol{u}^n \tag{2-7-10}$$

我们以后假定 C 是连续地依赖于 Δt，由于 C 是由位移算子组成，不依赖于 t，可得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}^1 &= C\boldsymbol{u}^0 = C\boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{u}^2 &= C\boldsymbol{u}^1 = C^2\boldsymbol{v} \\ &\vdots \\ \boldsymbol{u}^n &= C^n\boldsymbol{v} \end{aligned} \tag{2-7-11}$$

参 考 资 料

[1] 李德元，徐国荣，水鸿寿，何高玉，陈光南，袁国兴。二维非定常流体力学数值方法。科学出版社，1987。

[2] 计算数学讲义(四)，偏微方程数值解法。南京大学，1979。

[3] 忻孝康，刘儒勋，蒋伯诚。计算流体动力学。国防科技大学出版社，1989。

第三章　双曲型方程的差分解法

双曲型微分方程是流体动力学、固体动力学和爆炸力学中最常见的一类方程。例如一维、二维和三维理想流体的不定常流动，超音速下的无粘定常流以及爆炸力学中许多流体——弹塑性流动等都可以归结为用双曲型偏微分方程来描述的问题。和抛物型方程不同，在双曲型方程描述的物理现象中，状态量的扰动是以有限的速度在一定方向上传播的。而且即使问题的初始条件是充分光滑的，在解中也可能出现各种间断(例如激波等)，这就使得双曲型方程的数值计算有特殊的难点，在差分格式的定性分析上也是相当不完善的。本章着重介绍一些计算双曲型方程的差分格式，对格式的稳定性、收敛性、耗散性、色散性以及守恒性也做一些简单的讨论。

§3.1　差分方程的相容性、收敛性和稳定性

微分方程初值问题(2-7-1)式的差分格式以(2-7-8)式表示

$$B_1 u^{n+1} = B_0 u^n \tag{2-7-8}$$

将(2-7-1)式中的解 $u(x,t)$ 代入上式中，得到截断误差 R 为

$$R = \frac{B_1 u(x,t+\tau) - B_0 u(x,t)}{\tau} \tag{3-1-1}$$

式中 τ 为时间步长 Δt。

3.1.1　相容性(Consistency)

定义：如果空间步长 $h=\Delta x$ 和 τ 有函数关系

$$h = g(\tau)$$

且当 $\tau\to 0$ 时 h 也按上述函数关系趋近于零，这时如果 R 的范数趋近于零

$$\|R\|_{\tau\to 0} \to 0 \tag{3-1-2}$$

则称差分方程(2-7-8)与微分方程(2-7-1)是相容的。

3.1.2　收敛性(Convergence)

定义：设 $C(x,\tau_k)^{n_k}v(x)$ 和 $E(t)v(x)$ 分别为微分方程(2-7-1)和(2-7-2)的差分解和微分解。如果当 t 固定，时间步长序列为 $\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_k$，令 n_k 是最接近 t/τ_k 的正整数，也即当 $k\to\infty$ 时，$n_k\tau_k\to 0$。若有

$$\| C(x,\tau_k)^{n_k}v(x) - E(t)v(x) \| \underset{k\to\infty}{\to} 0 \qquad \forall\, v(x)\in L_2 \tag{3-1-3}$$

则说差分解收敛于微分解。

注意到，相容性和收敛性是两个完全不同的概念，相容性的定义中根本不涉及差分方程的解，而收敛性才涉及到差分方程的解和微分方程的解。事实上，和微分方程相容的差分方程的解可能不收敛于微分方程的解。

3.1.3 稳定性(Stability)

定义:如果存在常数 $k>0$,使得对所有满足 $0<\tau<\tau_0$,$0<n<T/\tau$ 的 τ 和 n,算子 $C(x,t)^n$ 是一致有界的,即不等式

$$\|C(x,t)^n\| \leqslant k \tag{3-1-4}$$

对于$\forall\ 0<\tau<\tau_0$,$0<n<T/\tau$ 一致成立,也就是说对于任意的初始值 $v(x)$ 有

$$\|u^n\| = \|C(x,\tau)^n v(x)\| \leqslant k\|v(x)\|$$

一致成立,则说差分方程(2-7-8)对于初始值问题(2-7-1),(2-7-2)是稳定的。这个稳定性定义又称为 Lax-Richtmyer 稳定,简称 L—R 稳定。若 $k\leqslant 1$,则称为强稳定。

3.1.4 (Lax)等价定理

如果微分方程的初值问题(2-7-1)和(2-7-2)是适定的,差分方程是与之相容的,则差分方程的稳定性就是其收敛性的充分必要条件。这样,以后对于此类问题只要研究稳定性就行了。

§3.2 常系数差分方程的稳定性

常系数差分方程的稳定性理论较为完整,常常推广应用到拟线性和非线性方程中去。本节介绍两种方法,第一种是 Fourier 方法,又称 Von Neumann-Richtmyer 方法,一般说来,适用于线性常系数初值问题,但是在实际应用中,较为广泛。第二种是 CFL 条件,它仅适用于双曲型方程,是古老但应用十分广泛的一种方法。还有一种常用方法,即 Hirt 启示性方法,也称泰勒展开法,应用于变系数和非线性情况,将在下一节中介绍。

3.2.1 Fourier 方法

此方法是 Von Neumann 在 1950 年提出的,有比较系统的数学理论。

考察偏微分方程组初值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Pu \approx 0 \qquad x\in R_d, 0<t\leqslant T \tag{2-7-1}$$

$$u(x,t)|_{t=0} = v(x) \qquad x\in R_d \tag{2-7-2}$$

现考虑 p 与 t 和 x 无关的情况,则(2-7-1)式可写成(2-7-3)形式

$$\frac{\partial u}{\partial t}\sum_{|\nu|\leqslant m} A_\nu \frac{\partial^{|\nu|}}{\partial x_1^{\nu_1}\cdots\partial x_d^{\nu_d}} u \tag{3-2-1}$$

式中 A_ν 是 $p\times p$ 阶常系数方阵,与(3-2-1)式相容的差分方程为

$$B_1 u^{n+1} = B_0 u^n \tag{3-2-2}$$

设差分算子 B_1 的逆算子 B_1^{-1} 存在,则

$$u^{n+1} = B_1^{-1}B_0 u^n = Cu^n \tag{3-2-3}$$

前面假定 A_ν 与 x、t 无关,故 C 亦与 x、t 无关,但与步长 h、τ 有关,若当 $\tau\to 0$ 时,h 也以一定方式趋于零,则 C 仅与 τ 有关,可得

$$u^{n+1} = C(\tau)u^n \tag{3-2-4}$$

下面用 Fourier 方法讨论常系数差分方程(3-2-2)式的稳定性。

一、增长矩阵

由(2-7-8)式

$$B_1 = \sum_{\beta \in N_1} B_1^{\beta}(\tau) T^{\beta}$$

$$B_0 = \sum_{\beta \in N_0} B_0^{\beta}(\tau) T^{\beta}$$

(3-2-2)式成为

$$\sum_{\beta \in N_1} B_1^{\beta}(\tau) T^{\beta} \boldsymbol{u}^{n+1} = \sum_{\beta \in N_0} B_0^{\beta} T^{\beta} \boldsymbol{u}^{n} \tag{3-2-5}$$

初始条件

$$\boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{v} \tag{3-2-6}$$

为了应用Fourier 方法，还必需扩展差分方程和初始条件的定义域，因为它们的解 $\boldsymbol{u}^n$ 及初值 $\boldsymbol{v}$ 仅在网格点上有意义，为此令(在一维情况下)

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{u}(x, n\tau) &= \boldsymbol{u}_j^n \\ \boldsymbol{F}(x) &= \boldsymbol{v}(jh) \end{aligned}\right\} \quad \left(j - \frac{1}{2}\right)h \leqslant x \leqslant \left(j + \frac{1}{2}\right)h \tag{3-2-7}$$

这样，$\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{F}$ 对于 x 在 $(j-1/2)h$ 和 $(j+1/2)h$ 范围内的任意值都有意义，又 j 是变量，使得 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{F}$ 在 $(-\infty, +\infty)$ 区间都有意义。将(3-2-7)代入(3-2-5)，使得差分方程的空间定义域展宽。上述扩展也适合于多维情况，为了方便起见，仍用原来符号 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$，所不同的是 $\boldsymbol{x}$ 的定义域已经展宽，适合应用 Fourier 变换了。

若 $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$ 是周期函数，并且满足 Dirichlet 条件，则 $\boldsymbol{u}^n$ 和 $\boldsymbol{u}^{n+1}$ 可展为 Fourier 级数

$$\boldsymbol{u}^n(x) = (l_1, l_2, \cdots, l_d)^{-1/2} \sum_{k \in \mathscr{S}} \hat{\boldsymbol{u}}^n(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

$$\boldsymbol{u}^{n+1}(\boldsymbol{x}) = (l_1, l_2, \cdots, l_d)^{-1/2} \sum_{k \in \mathscr{S}} \hat{\boldsymbol{u}}^{n+1}(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

式中 $\boldsymbol{u}(x_1, x_2, \cdots, x_d)$ 的周期为 $(l_1, l_2, \cdots, l_d)$，而

$$T^{\beta} \boldsymbol{u}^n(\boldsymbol{x}) = (l_1, l_2, \cdots, l_d)^{-1/2} \sum_{k \in \mathscr{S}} \hat{\boldsymbol{u}}^n)(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x+\beta h)}$$

则(3-2-5)式两端展开为

$$\begin{aligned} &(l_1, l_2, \cdots, l_d)^{-1/2} \sum_{\beta \in N_1} B_1^{\beta}(\tau) \sum_{k \in \mathscr{S}} \hat{\boldsymbol{u}}^{n+1}(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\beta h} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \\ &= (l_1, l_2, \cdots, l_d)^{-1/2} \sum_{\beta \in N_0} B_0^{\beta}(\tau) \sum_{k \in \mathscr{S}} \hat{\boldsymbol{u}}^n(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\beta h} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \end{aligned}$$

即有

$$\begin{aligned} &\sum_{k \in \mathscr{S}} \left[\sum_{\beta \in N_1} B_1^{\beta}(\tau) \hat{\boldsymbol{u}}^{n+1}(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\beta h} \right] \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \\ = &\sum_{k \in \mathscr{S}} \left[\sum_{\beta \in N_0} B_0^{\beta}(\tau) \hat{\boldsymbol{u}}^n(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\beta h} \right] \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \end{aligned} \tag{3-2-8}$$

等式两边是两个 Fourier 级数，它们相等则必有它们的系数相等。令

$$\sum_{\beta \in N_1} B_1^{\beta}(\tau) \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\beta h} = H_1$$

$$\sum_{\beta \in N_0} B_0^{\beta}(\tau) \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\beta h} = H_0$$

则可得

$$H_1\hat{u}^{n+1}(k) = H_0\hat{u}^n(k) \qquad k \in \mathscr{L} \tag{3-2-9}$$

显然，H_1 和 H_0 均为矩阵。设 H_1 有逆矩阵 H_1^{-1}，则有

$$\begin{aligned}\hat{u}^{n+1}(k) &= H_1^{-1}H_0\hat{u}^n(k) \\ &= G(k,\tau)\hat{u}^n(k)\end{aligned} \tag{3-2-10}$$

这里，$G=H_1^{-1}H_0$。称为增长矩阵。在(2-7-1)式中，若 $P=1$，则 G 退化为一个数，称为增长因子。

因为 G 与 t 无关，则有

$$\hat{u}^n(k) = G^n\hat{u}^0(k) \qquad k \in \mathscr{L} \tag{3-2-11}$$

如果 $u(x)$ 为非周期函数，则不能展开成 Fourier 级数。但如果 $u(x)$ 在 d 维空间 R_d 内平方可积，则可用 Fourier 积分代之

$$u(x) = (2\pi)^{-d/2}\int_{R_d}\hat{u}(k)e^{ikx}dk$$

对(3-2-5)式两边取 Fourier 变换有

$$\begin{aligned}&\sum_{\beta\in N_1}B_1^\beta(\tau)(2\pi)^{-d/2}\int_{Rd}\hat{u}^{n+1}(k)e^{ik\beta h}e^{ikx}dk \\ =&\sum_{\beta\in N_0}B_0^\beta(\tau)(2\pi)^{-d/2}\int_{Rd}\hat{u}^n(k)e^{ik\beta h}e^{ikx}dk\end{aligned}$$

积分符号和求和号可以互换次序

$$\begin{aligned}&(2\pi)^{-d/2}\int_{R_d}\sum_{\beta\in N_1}B_1^\beta(\tau)\hat{u}^{n+1}(k)e^{ik\beta h}e^{ikx}dk \\ =&(2\pi)^{-d/2}\int_{R_d}\sum_{\beta\in N_0}B_0^\beta(\tau)\hat{u}^n(k)e^{ik\beta h}e^{ikx}dk\end{aligned}$$

两边系数相等，得

$$\sum_{\beta\in N_1}B_1^\beta(\tau)e^{ik\beta h}\hat{u}^{n+1}(k) = \sum_{\beta\in N_0}B_0^\beta(\tau)e^{ik\beta h}\hat{u}^n(k) \qquad k \in R_d$$

和(3-2-9)式相比，不同之点仅是 k 的取值范围不同，形式是一样的。前者 $\mathscr{L}$ 表示离散点的无穷集合，后者 R_d 是整个 d 维空间。现选非周期函数来进行研究，其结果对于周期函数也是适用的。这样，就统一以 $\mathscr{L}$ 来表示。

二、Von Neumann 必要条件

设函数 $u(x)\in L_2$ 的 Fourier 变换为 $\hat{u}(k)$，由(3-2-4)式

$$u^{n+1} = C(\tau)u^n$$

两边作富利叶变换

$$(2\pi)^{-d/2}\int_{\mathscr{L}}\hat{u}^{n+1}(k)e^{ikx}dk = (2\pi)^{-d/2}\int_{\mathscr{L}}\hat{C}(\tau)\hat{u}^n(k)e^{ikx}dk$$

$$\int_{\mathscr{L}}[\hat{u}^{n+1}(k) - \hat{C}(\tau)\hat{u}^n(k)]e^{ikx}dk = 0$$

得

$$\hat{u}^{n+1}(k) = \hat{C}(\tau)\hat{u}^n(k)$$

对照(3-2-10)式可得，$C(\tau)$的 Fourier 变换就是 $G(k,\tau)$。根据 Parseval 关系式有

$$\|C(\cdot)\| = \|\hat{C}(\cdot)\|$$

式中‖·‖表示函数C的L_2模，上式表示C和G的一致有界性是等价的，则稳定性条件(3-1-4)式可以等价为

$$\| G^n(k,\tau) \| < k \qquad (3\text{-}2\text{-}12)$$
$$\forall k \in \mathscr{L} \quad , \quad 0<\tau<\tau_0 \quad , \quad 0<n<T/\tau$$

增长矩阵G的模不容易求得，而谱半径$\rho(G)$较易求得。矩阵的特征值λ_i中的最大绝对值称为谱半径，设G为$p\times p$阶矩阵，则

$$\rho(G) = \max|\lambda_i| \qquad i=1,2,\cdots,p$$

设v_i是G的特征向量，则有

$$Gv_i = \lambda_i v_i$$
$$|\lambda_i| \, \| v_i \| = \| Gv_i \| \leqslant \| G \| \, \| v_i \|$$
$$|\lambda_i| \leqslant \| G \| \qquad i=1,2,\cdots,p$$

即

$$\rho(G) \leqslant \| G \|$$

因此，若用$\rho(G)$代替G作为稳定性的判别，只能作为必要条件。若存在常数$C_1>0$，使得

$$[\rho(G)]^n \leqslant C_1$$
$$\forall k \in \mathscr{L} \quad , \quad 0<\tau<\tau_0 \quad , \quad 0<n\leqslant \frac{T}{\tau}$$

一致成立，是差分方程稳定的必要条件。

若$C_1\leqslant 1$，相当于前面讨论的强稳定情况。现设$C_1\geqslant 1$，则

$$\rho(G) \leqslant C_1^{1/n} \qquad 0<n\leqslant T/\tau$$

由上式可得

$$\rho(G) \leqslant C_1^{\tau/T}$$

因为$C_1^{\tau/T}$对于τ来说在区间$0<\tau<T$内是一个凹函数，且在$\tau=0$处等于1，这样，在τ-y图中总可以找到直线

$$y = 1 + C_2\tau$$

在$0<\tau<T$内在$y=C_1^{\tau/T}$的上方，见图3-2-1。

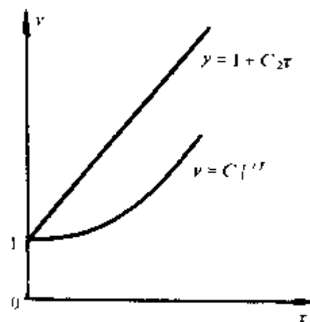


图 3-2-1 τ-y图

设矩阵G的特征值为$\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$，则差分方程(2-7-10)式稳定的必要条件是它的增长矩阵$G(\tau,k)$的特征值λ_i满足不等式

$$|\lambda_i| \leqslant 1 + O(\tau) \quad , \quad i=1,2,\cdots,p \qquad (3\text{-}2\text{-}13)$$
$$\forall k \in \mathscr{L} \quad , \quad 0<\tau<\tau_0 \quad , \quad 0<n<T/\tau$$

一致成立。

这个条件称为差分方程稳定的 Von Neumann 必要条件。

三、Von Neumann 条件作为充分条件。

前面给出了差分格式稳定的 Von Neumann 必要条件，但在实用上更重要的是它的充分条件。事实上，在某些情况下，Von Neumann 条件也是充分的。

(1)当$p=1$时，这时增长矩阵G退化成一个数，这时 Von Neumann 必要条件也是稳定的充分条件。

证：因为当$|G|\leqslant 1+C_2\tau$时，有

$$G^n \leqslant (1+C_2\tau)^n \leqslant e^{C_2 T}$$

这是对满足 $0<\tau<T, 0<n\tau\leqslant T$ 的所有 τ 和 n 都一致成立的。而 e^{C_2T} 是有限值，因此 $|G^n|$ 有界，以此得证。

(2)当矩阵 G 是正规矩阵时 Von Neumann 条件也是稳定的充分条件。

因为若 G 是一个正规矩阵，则由矩阵理论可知，它的范数就等于它的谱半径，于是问题得证。

(3)由于

$$\| G \| = (\rho(G^*G))^{1/2}$$

所以如果有

$$\rho(G^*G) \leqslant 1 + O(\tau)$$

对所有满足 $0<\tau<T, k\in\mathscr{L}$ 的 τ 和 k 都一致成立，则 Von Neumann 条件也是稳定的充分条件。

(4)如果增长矩阵 G 的归一化特征向量(即 φ^m 的模为 1) $\varphi^{(m)}=(\varphi_1^{(m)},\varphi_2^{(m)},\cdots,\varphi_p^{(m)})^T, m=1,2,\cdots,p$ 所构成的矩阵 Q

$$Q = \begin{bmatrix} \varphi_1^1 & \varphi_1^2 & \cdots & \cdots & \varphi_1^p \\ \varphi_2^1 & \varphi_2^2 & \cdots & \cdots & \varphi_2^p \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \varphi_p^1 & \varphi_p^2 & \cdots & \cdots & \varphi_p^p \end{bmatrix}$$

若存在一常数 $a>0$，使得

$$|\det Q| \geqslant a > 0$$

则 Von Neumann 必要条件也是充分条件。

它的证明比较烦琐，这里就省略了。

四、Von Neumann 条件的应用

例 1 匀流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

其中 a 为常数

用显式格式构造差分方程

$$\Delta_t u_j^n + \frac{a}{2}(\Delta_x u_j^n + \Delta_x u_{j-1}^n) = 0$$

展开有

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = 0 \tag{3-2-14}$$

现在来研究(3-2-14)式的稳定性。作 Fourier 变换有

$$\frac{\hat{u}^{n+1}(k) - \hat{u}^n(k)}{\tau} + a\frac{\hat{u}^n(k)e^{ikh} - \hat{u}^n(k)e^{-ikh}}{2h} = 0$$

即 $$\hat{u}^{n+1}(k) = \left[1 - \frac{a\tau}{2h}(e^{ikh} - e^{-ikh})\right]\hat{u}^n(k) = G\hat{u}^n(k)$$

这相当于 $p=1$ 时的情况。G 是增长因子。利用欧拉公式可得

$$G = 1 - \frac{a\tau}{2h}(\cos kh + i\sin kh - \cos kh + i\sin kh)$$

$$= 1 - \frac{a\tau}{h} i\sin kh$$

所以

$$|G| = \left[1 + \left(\frac{a\tau}{h}\right)^2 \sin^2 kh\right]^{1/2} \geqslant 1$$

设 τ/h 为常数，不满足 $|G|<1+O(\tau)$ 的条件，所以格式是无条件不稳定的。

例 2 仍是匀流方程，差分格式改用

$$\Delta_t u_j^n + a\nabla_x u_j^n = 0$$

即

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = 0$$

作 Fourier 变换

$$\frac{\hat{u}^{n+1}(k) - \hat{u}^n(k)}{\tau} + a\frac{\hat{u}^n(k) - \hat{u}^n(k)e^{-ikh}}{h} = 0$$

所以有

$$\hat{u}^{n+1}(k) = \left[1 - \frac{a\tau}{h}(1 - e^{-ikh})\right]\hat{u}^n(k)$$

同前一样，有

$$G = 1 - (a\tau/h)(1 - \cos kh + i\sin kh)$$

所以

$$\begin{aligned}|G| &= \left\{\left[1-\frac{a\tau}{h}(1-\cos kh)\right]^2 + \left(\frac{a\tau}{h}\right)^2 \sin^2 kh\right\}^{1/2} \\ &= \left\{1-\frac{2a\tau}{h}(1-\cos kh) + 2\left(\frac{a\tau}{h}\right)^2(1-\cos kh)\right\}^{1/2} \\ &= \left\{1-\frac{2a\tau}{h}(1-\cos kh)\left(1-\frac{a\tau}{h}\right)\right\}^{1/2}\end{aligned}$$

式中 $(1-\cos kh) \geqslant 0$

讨论：

①若 $a<0$，$1-\frac{a\tau}{h}>0$，则式中第二项为负，$\|G\| \geqslant 1+O(\tau)$，所以格式是不稳定的。

②若 $a>0$，$\frac{a\tau}{h}\leqslant 1$，则 $|G|\leqslant 1$，符合 Von Neumann 稳定的必要条件，而又因为 G 是一个增长因子，所以条件又是充分的。因此

$$\frac{a\tau}{h} \leqslant 1$$

是该差分格式稳定的充分必要条件。

例 3 给出波动方程

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial v}{\partial x} \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial u}{\partial x} \end{cases}$$

取差分格式的

$$\Delta_t u_j^n = \Delta_x v_{j-\frac{1}{2}}^n$$

$$\Delta_t v_{j+\frac{1}{2}}^n = \Delta_x u_j^{n+1}$$

展开为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = \frac{v_{j+\frac{1}{2}}^n - v_{j-\frac{1}{2}}^n}{h}$$

$$\frac{v_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}-v_{j+\frac{1}{2}}^{n}}{\tau}=\frac{u_{j+1}^{n+1}-u_{j}^{n+1}}{h} \tag{3-2-15}$$

下面对格式的稳定性来进行分析。

(1)求增长矩阵 G:

作 Fourier 变换

$$\frac{\hat{u}^{n+1}(k)-\hat{u}^{n}(k)}{\tau}=\frac{\hat{v}^{n}(k)(e^{ikh/2}-e^{-ikh/2})}{h}$$

$$\frac{(\hat{v}^{n+1}(k)-\hat{v}^{n}(k))e^{ikh/2}}{\tau}=\frac{\hat{u}^{n}(k)(e^{ikh}-1)}{h}$$

整理成

$$\hat{u}^{n+1}(k)=\hat{u}^{n}(k)+i\alpha\hat{v}^{n}(k)$$

$$\hat{v}^{n+1}(k)=\hat{v}^{n}(k)+i\alpha\hat{u}^{n+1}(k)$$

其中

$$\alpha=\frac{\tau}{h}2\sin\frac{kh}{2}$$

上式又可用矩阵的形式写出

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\ i\alpha & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{u}\\ \hat{v}\end{bmatrix}^{n+1}=\begin{bmatrix}1 & i\alpha\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{u}\\ \hat{v}\end{bmatrix}^{n},$$

所以增长矩阵为

$$G=\begin{bmatrix}0 & 1\\ i\alpha & -1\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}1 & i\alpha\\ 0 & -1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & i\alpha\\ i\alpha & 1-\alpha^2\end{bmatrix}$$

很容易验证

$$GG^{*}=\begin{bmatrix}1 & i\alpha\\ i\alpha & \beta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -i\alpha\\ -i\alpha & \beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1+\alpha^2 & -i\alpha(1-\beta)\\ i\alpha(1-\beta) & \alpha^2+\beta^2\end{bmatrix}$$

$$G^{*}G=\begin{bmatrix}1 & -i\alpha\\ -i\alpha & \beta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & i\alpha\\ i\alpha & \beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1+\alpha^2 & i\alpha(1-\beta)\\ -i\alpha(1-\beta) & \alpha^2+\beta^2\end{bmatrix}$$

这里 $\beta=1-\alpha^2$,G^{*} 是 G 的共轭矩阵。显然

$$GG^{*}\neq G^{*}G$$

即 G 不是一个正规矩阵。

(2)求谱半径

首先求特征值。令

$$\det(G-\lambda E)=0$$

即

$$\begin{vmatrix}1-\lambda & i\alpha\\ i\alpha & 1-\alpha^2-\lambda\end{vmatrix}=0$$

展开为

$$(1-\lambda)(1-\alpha^2-\lambda)+\alpha^2=0$$

可以解出

$$\lambda=1-\frac{\alpha^2}{2}\pm\frac{\alpha}{2}\sqrt{\alpha^2-4}$$

讨论：

①若 $\alpha^2>4$，则有谱半径 $\rho(G)=\max|\lambda|>1$。

②$\alpha^2\leqslant4$，则由

$$\lambda=1-\frac{\alpha^2}{2}\pm i\frac{\alpha}{2}\sqrt{4-\alpha^2}$$

$$|\lambda|^2=\left(1-\frac{\alpha^2}{2}\right)^2+\frac{\alpha^2}{4}(4-\alpha^2)$$

$$=1-\alpha^2+\frac{\alpha^4}{4}+\alpha^2-\frac{\alpha^4}{4}=1$$

所以 $\alpha^2<4$ 即 $|\tau/h|\leqslant1$ 是格式(3-2-15)式稳定的必要条件。

(3)求格式稳定的充分条件：

注意到，在这里 $p\neq1$，G 不是正规矩阵，所以我们只好考察其规一化特征向量矩阵，来研究格式的稳定性。

求特征向量 $\boldsymbol{x}$，由

$$G\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$$

即

$$\begin{bmatrix}g_{11}-\lambda & g_{12}\\ g_{21} & g_{22}-\lambda\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_{11}\\ x_{12}\end{bmatrix}=0$$

分别以 λ_1 和 λ_2 代入，可得 $(x_{11},x_{12})^T$ 和 $(x_{21},x_{22})^T$。

将上式展开有

$$\begin{cases}(g_{11}-\lambda_1)x_{11}+g_{12}x_{12}=0 & (3\text{-}2\text{-}16)\\ g_{21}\lambda_{11}+(g_{22}-\lambda_1)x_{12}=0 & (3\text{-}2\text{-}17)\end{cases}$$

现已知

$$G=\begin{bmatrix}1 & \mathrm{i}\alpha\\ \mathrm{i}\alpha & 1-\alpha^2\end{bmatrix}$$

方程(3-2-16)、(3-2-17)式是齐次的，它有非零解的充要条件是其系数行列式为零。将 G 代入，可见是满足的。

将 λ_1 代入(3-2-16)式有

$$\frac{x_{11}}{x_{12}}=\frac{g_{12}}{-g_{11}+\lambda_1}=\frac{\mathrm{i}\alpha}{-1+\left(1-\frac{\alpha^2}{2}+i\frac{\alpha}{2}\sqrt{4-\alpha^2}\right)}$$

将 λ_2 代入(3-2-16)式有

$$\frac{x_{21}}{x_{22}}=\frac{g_{12}}{-g_{11}+\lambda_2}=\frac{\mathrm{i}\alpha}{-1+\left(1-\frac{\alpha^2}{2}-i\frac{\alpha}{2}\sqrt{4-\alpha^2}\right)}$$

取 $x_{11}=1$

则 $x_{12}=\frac{\alpha}{2}\mathrm{i}+\frac{1}{2}\sqrt{4-\alpha^2}$

$$|x_1|=|(x_{11},x_{12})^T|$$

$$=\left[1+\frac{1}{4}(4-\alpha^2)+\frac{\alpha^2}{4}\right]^{1/2}=\sqrt{2}$$

规一化特征向量为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|(x_{11},x_{12})^{\mathrm{T}}| = \begin{bmatrix} \dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ \dfrac{\alpha}{2\sqrt{2}}i + \dfrac{\sqrt{4-\alpha^2}}{2\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

取 $x_{21}=1$

则 $x_{22}=\frac{\alpha}{2}i-\frac{1}{2}\sqrt{4-\alpha^2}$

其规一化特征向量为

$$\begin{bmatrix} \dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ \dfrac{\alpha}{2\sqrt{2}} - \dfrac{\sqrt{4-\alpha^2}}{2\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

于是，规一化特征向量矩阵 Q 为

$$Q = \begin{bmatrix} \dfrac{1}{\sqrt{2}} & \dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ i\dfrac{1}{2\sqrt{2}}(\alpha+\sqrt{4-\alpha^2}) & i\dfrac{1}{2\sqrt{2}}(\alpha-\sqrt{4-\alpha^2}) \end{bmatrix}$$

$$|\det Q| = \left|\frac{\sqrt{4-\alpha^2}}{2}\right|$$

当 $\alpha^2<4$ 时

$$|\det Q| \geqslant a > 0$$

式中 a 为正实数，此时 Von Neumann 条件是充分条件，

即有

$$\left|\frac{\tau}{h}2\sin\frac{kh}{2}\right| < 2$$

所以

$$|\tau/h| < 1$$

是格式(3-2-15)式稳定的充分必要条件。

3.2.2 C—F—L 稳定性条件

1928 年，Courant，Friedrichs & Lewy 发表论文，首先提出了差分方法的收敛性问题，并给出了双曲型方程显式差分格式收敛的必要条件，即 C—F—L 条件，有时又简称为 Courant 条件。这个条件可以简述为：差分方程的依赖区域必须包含微分方程的依赖区域。

注意到，对于常系数双曲型方程而言，收敛性条件与稳定性条件是等价的，所以这时的 Courant 条件又称为 Courant 稳定性条件。下面我们用一些例题来具体说明它的含意。

设有波动方程的初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}-a^2\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t) \quad , \quad |x|<+\infty \quad , \quad 0<t<T\\ u(x,0)=\varphi(x)\\ \left.\dfrac{\partial u}{\partial t}\right|_{t=0}=\psi(x)\end{cases}$$

用显式差分格式建立差分方程

$$\frac{u_j^{n+1}-2u_j^n+u_j^{n-1}}{\tau^2}-a^2\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}=f_j^n$$

令 $s=\dfrac{a\tau}{h}$

则有

$$u_j^{n+1}=s^2(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)+2(1-s^2)u_j^n-u_j^{n-1}-s^2h^2f_j^n$$

$$j=0,\pm1,\cdots;n=1,2,\cdots,M-1;M=\frac{T}{\tau}$$

$$u_j^0=\varphi(jh) \quad , \quad j=0,\pm1,\cdots$$

$$u_j^1=u_j^0+\tau\psi(jh) \quad , \quad j=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

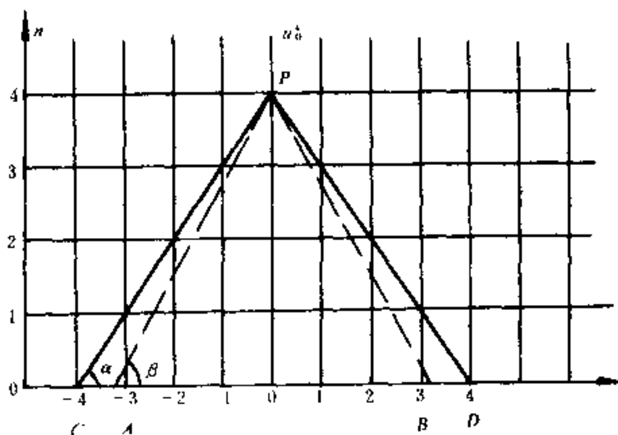


图 3-2-2　P 点的依赖区域

例如要求 P 点的值 u_0^4，见图 3-2-2，从 $n=0$ 的初始值开始计算，每算一层，两边各少一点，因此要求 u_0^4，需要 $u_{-4}^0\sim u_4^0$ 范围的初值，即需要 CD 部分的初值。而 PCD 称为差分方程的确定三角形。CD 上的初值称为 P 点解的依赖区域。而微分方程在 P 点的依赖区域由其发出的两根特征线

$$x-at=b_1$$

$$x+at=b_2$$

所夹的部分 AB 决定。

根据 C—F—L 条件，应有

$$\overline{CD}\geqslant\overline{AB}$$

即　　$\text{tg}\beta\geqslant\text{tg}\alpha$

而　　$\text{tg}\beta=\dfrac{1}{a}$　，　$\text{tg}\alpha=\dfrac{\tau}{h}$

所以应有

$$\left|\frac{a\tau}{h}\right| \leqslant 1$$

这就是常系数双曲型方程的显式差分格式稳定性的必要条件(注意到收敛性与稳定性此时是等价的)。

仍以匀流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$u(x,0) = \varphi(x)$$

为例。差分格式用前差,有

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{h} = 0$$

原方程的特征线为

$$x - at = \text{const}$$

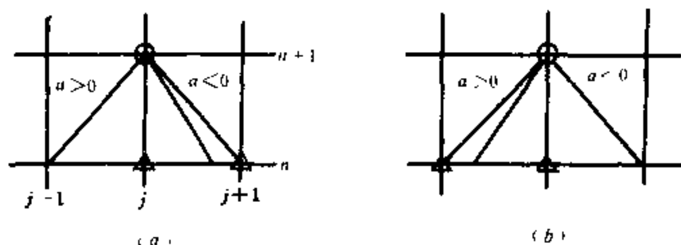


图 3-2-3 匀流方程的依赖区域

见图 3-2-3(a),当 $a>0$ 时,由$(j,n+1)$点发出的特征线在差分方程确定的三角形之外。由 C—F—L 条件知,这是不稳定的。当 $a<0$ 时,如果

$$\left|\frac{a\tau}{h}\right| \leqslant 1$$

则由 C—F—L 条件可知,格式是稳定的。

若对$\frac{\partial u}{\partial x}$用后差,则

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = 0$$

由图 3-2-3(b)可见,当 $a<0$ 时,格式是不稳定的。若 $a>0$,且$|a\tau/h|\leqslant 1$,格式是稳定的。

可见,为了使特征线落在差分方程的确定三角形内,要注意格式和特征线的走向要一致。

3.2.3 弱稳定

定义:如果存在常数 $k>0$ 和 $\alpha>0$,使得对所有满足 $0<\tau<\tau_0$,$0<n\leqslant\frac{T}{\tau}$的 τ 和 n,差分方程

$$u_j^{n+1} = C(x,\tau)u_j^n$$

的解具有下面不等式

$$\|u^n\| \leqslant k\tau^{-\alpha}\|v\|$$

则称上述差分格式是弱稳定的。

前面讲的 L—R 稳定相当于 $\alpha=0$ 时的情况。对于 L—R 稳定

$$\|u^n\| \leqslant k\|v\|$$

而 $\quad k\leqslant k\tau^{-\alpha}$

所以必然符合弱稳定条件。

对于常系数差分方程，如果增长矩阵 $G(\tau,k)$ 是一致有界的（注意，不是 G^n 一致有界），则 Von Neumann 条件是弱稳定的充要条件。

例 对于微方程

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} & (3\text{-}2\text{-}18) \\[2mm] \dfrac{\partial v}{\partial t}=0 & (3\text{-}2\text{-}19) \end{cases}$$

差分方程取

$$\begin{cases} \dfrac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}=\dfrac{v_{j+1}^n-2v_j^n+v_{j-1}^n}{h^2} \\[2mm] \dfrac{v_j^{n+1}-v_j^n}{\tau}=0 \end{cases}$$

对差分方程取 Fourier 变换

$$\begin{cases} \hat{u}^{n+1}(k)=\hat{u}^n(k)+\dfrac{\tau}{h^2}(e^{ikh}-2+e^{-ikh})\hat{v}^n(k) \\[2mm] \hat{v}^{n+1}(k)=\hat{v}^n(k) \end{cases}$$

或写成

$$\begin{cases} \hat{u}^{n+1}(k)=\hat{u}^n(k)+\dfrac{\tau}{h^2}(-2+2\cos kh)\hat{v}^n(k) \\[2mm] \hat{v}^{n+1}(k)=\hat{v}^n(k) \end{cases}$$

增长矩阵为

$$G=\begin{bmatrix} 1 & -\dfrac{2\tau}{h^2}(1-\cos kh) \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

求得特征值 $\lambda_1=\lambda_2=1$，则 $\rho(G)\leqslant 1+O(\tau)$，满足 Von Neumann 条件。

再求 $\|G\|_2$，由

$$G^TG=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -b & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & -b \\ 0 & 1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & -b \\ -b & b^2+1 \end{bmatrix}$$

式中，$b=\dfrac{2\tau}{h^2}(1-\cos kh)$

特征方程

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & -b \\ -b & b^2+1-\lambda \end{vmatrix}=(1-\lambda)(b^2+1-\lambda)-b^2=0$$

解出

$$\lambda=1+\frac{b^2}{2}\pm\sqrt{\left(1+\frac{b^2}{2}\right)^2-1}$$

上式中根号前取正为 $\lambda\max$ 值，所以

$$\|G\|_2=\sqrt{\rho(G^TG)}=\left[1+\frac{b^2}{2}\pm\sqrt{\left(1+\frac{b^2}{2}\right)^2-1}\right]^{\frac{1}{2}}$$

当τ/h^2为常数时b亦为常数，可见$\|G\|_2$不满足 Von Neumann 条件，所以差分格式不满足弱稳定的充分条件。

应该指出，若对方程加上一个微扰动后，L—R 稳定的格式仍然保持稳定，而弱稳定格式则不能保持稳定。例如，对上述方程(3-2-19)式加上一微扰，使方程成为

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -u$$

差分方程变为

$$\frac{v_j^{n+1} - v_j^n}{\tau} = -u_j^n$$

作 Fourier 变换，有

$$\hat{v}^{n+1}(k) - \hat{v}^n(k) = -\tau\hat{u}^n(k)$$

可以求出增长矩阵为

$$G = \begin{bmatrix} 1 & -b \\ -\tau & 1 \end{bmatrix}$$

特征值为

$$\lambda = 1 \pm \sqrt{\tau b} = 1 \pm \frac{\tau}{h}\sqrt{2(1-\cos kh)}$$

所以当τ/h为常数时

$$\rho(G) = 1 + \frac{\tau}{h}[2(1-\cos kh)]^{\frac{1}{2}} > 1 + O(\tau)$$

可见，不满足 Von Neumann 稳定性条件。

§3.3 差分方程的耗散性与色散性

对于与微分方程相容的差分方程，前面讨论了稳定性和收敛性，但是稳定和收敛的差分方程的解和微分方程的解仍存在差别，这种差别在准确解发生剧变处更为明显。一种是在剧变(各种间断)处解被“光滑化”，即解随空间的变化缓和了，这就是耗散性。实际上如果没有耗散性，难以保证具有间断解的差分方程的稳定性。另一种是在剧变处解产生“高频振荡”，虽然不太影响差分方程的稳定性，却使得解的精度下降，这就是色散性。对于双曲型差分方程，需要一定的耗散性，应当尽量减少色散性；对于抛物型差分方程，由于本身具有强耗散性，使得其色散性被削弱了，因此影响很小。

3.3.1 泰勒展开法

Hirt、Яненко 和 Шокин 在 1968 年提出了一个适用于非线性或变系数差分方程的稳定性的启示性差别方法，后来 Warming 和 Hyett 提出了比较完整的泰勒展开法，该方法是将与微分方程相容的差分方程作泰勒展开，消元得到等价的“修改的偏微分方程 MPDE(Modified Partial Differential Equation)”，对其中的差分余项进行稳定性的启示性分析，同时也进行耗散性和色散性分析。

下面举例介绍如何用自循环消元法得到 MPDE。

源方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \qquad a > 0$$

为了书写方便改写成：$\frac{\partial u}{\partial t}=u_t$，$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=u_{xx}$，$\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}=u_{xxx}=u_{x^3}$等等，则有

$$u_t + au_x = 0$$

与之相容的 Lax－Wemdroff 差分格式

$$u_j^{n+1} - u_j^n + \frac{c}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) - \frac{c^2}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) = 0 \qquad (3\text{-}3\text{-}1)$$

式中　$c=\frac{a\tau}{h}$

对上式各项作泰勒展开

$$u(j,n+1) - u(j,n) = \tau\left(u_t + \frac{\tau}{2}u_{tt} + \frac{\tau^2}{3!}u_{t^3} + \frac{\tau^3}{4!}u_{t^4} + \cdots\right)$$

$$\frac{a\tau}{2h}[u(j+1,n) - u(j-1,n)] = \tau\left(au_x + \frac{ah^2}{3!}u_{x^3} + \frac{ah^4}{5!}u_{x^5} + \cdots\right)$$

$$\frac{a^2\tau^2}{2h^2}[u(j+1,n) - 2u(j,n) + u(j-1,n)] = \tau\left(-\frac{a^2\tau}{2}u_{xx} - \frac{a^2\tau h^2}{4!}u_{x^4} + \cdots\right)$$

上述三式中等号右端偏导数均为 $u(j,n)$ 的偏导数，将上述三式代入(3-3-1)得

$$u_t + \frac{\tau}{2}u_{tt} + \frac{\tau^2}{3!}u_{t^3} + \frac{\tau^3}{4!}u_{t^4} + au_x - \frac{a^2\tau}{2}u_{xx} + \frac{ah^2}{3!}u_{x^3} - \frac{a^2\tau h^2}{4!}u_{x^4} + \cdots = 0 \qquad (a)$$

对(a)式保留 u_t 项，设法消去带时间偏导数的其它项，如 u_{tt}，u_{xt}，u_{t^3}等。在消元过程中，为了保持方程的等价性，不得使用源方程，只能使用(a)式，最后得到的方程称为 MPDE。

为了消去 u_{tt}项，可将(a)式对时间求偏导数，再乘以$-\frac{\tau}{2}$，将得到的式子和(a)式相加，即可消去 u_{tt}项。用类似的方法消去其余含时间偏导数项，具体消元过程见表 3-3-1。表中第一行是偏导数项，第二行及以下各行是各公式中相应偏导的系数，表 3-3-1 中计算到消去带时间偏导数的四阶偏导数项，需要时可以继续算下去，以消去更高阶的时间偏导数项。将表 3-3-1 中 9 个方程相加，得到与 Lax－Wendroff 差分格式等价的 MPDE

表 3-3-1　求 MPDE

	u_t	u_x	u_{tt}	u_{xt}	u_{xx}	u_{t^3}	u_{t^2x}	u_{tx^2}	u_{x^3}	u_{t^4}	u_{t^3x}	$u_{t^2x^2}$	u_{tx^3}	u_{x^4}
(a)	1	a	$\frac{\tau}{2}$		$-\frac{a\tau^2}{2}$	$\frac{\tau^2}{6}$			$\frac{h^2a}{6}$	$\frac{\tau^3}{24}$				$-\frac{\tau h^2a^2}{24}$
$-\frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial t}(a)$			$-\frac{\tau}{2}$	$-\frac{\tau a}{2}$		$-\frac{\tau^2}{4}$		$\frac{\tau^2a^2}{4}$		$-\frac{\tau^3}{12}$			$-\frac{\tau h^2a^2}{12}$	
$\frac{\tau a}{2}\frac{\partial}{\partial x}(a)$				$\frac{\tau a}{2}$	$\frac{\tau a^2}{2}$		$\frac{\tau^2a}{4}$		$-\frac{\tau^2a^3}{4}$		$\frac{\tau^3a}{12}$			$\frac{\tau h^2a^2}{12}$
$\frac{\tau^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(a)$						$\frac{\tau^2}{12}$	$\frac{\tau^2a}{12}$			$\frac{\tau^3}{24}$		$-\frac{\tau^3a^2}{24}$		
$-\frac{\tau^2a}{3}\frac{\partial^2}{\partial t\partial x}(a)$							$-\frac{\tau^2a}{3}$	$-\frac{\tau^2a^2}{3}$			$-\frac{\tau^3a}{6}$		$\frac{\tau^3a^9}{6}$	
$\frac{\tau^2a^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(a)$								$\frac{\tau^2a^2}{12}$	$\frac{\tau^2a^3}{12}$			$\frac{\tau^3a^2}{24}$		$-\frac{\tau^3a^4}{24}$
$\frac{\tau^3a}{12}\frac{\partial^3}{\partial t^2\partial x}(a)$											$\frac{\tau^3a}{12}$	$\frac{\tau^3a^2}{12}$		
$-\frac{\tau^3a^2}{12}\frac{\partial^3}{\partial t\partial x^2}(a)$												$-\frac{\tau^3a^2}{12}$	$-\frac{\tau^3a^3}{12}$	
$\frac{\tau a}{12}(h^2-\tau^2a^2)\frac{\partial^3}{\partial x^3}(a)$													$\frac{\tau h^2a}{12}-\frac{\tau^3a^3}{12}$	$\frac{\tau h^2a^2}{12}-\frac{\tau h^3a^4}{12}$

$$u_t + au_x = -\frac{a}{6}(h^2 - a^2\tau^2)u_{x^3} - \frac{a^2\tau}{8}(h^2 - a^2\tau^2)u_{x^4} + \cdots \tag{3-1-2}$$

上式中等号右边的各项称为差分余项，将上式和源方程相比较可知差分余项是多出来的部分。对于一阶偏微分方程

$$u_t = Lu$$

其相容的差分方程为

$$B_1 u_j^{n+1} = B_0 u_j^n \tag{2-7-8}$$

与(2-7-8)式等价的 MPDE

$$u_t - Lu = \sum_{l=1}^{\infty} \nu_{2l} \frac{\partial^{2l} u}{\partial x^{2l}} + \sum_{m=1}^{\infty} \mu_{2m+1} \frac{\partial^{2m+1} u}{\partial x^{2m+1}} \tag{3-1-3}$$

右侧差分余项中第一项是偶数阶偏导数项，称为耗散项，其系数 ν_{2l} 称为耗散项系数；第二项是奇数阶偏导数项，称为色散项，其系数 μ_{2m+1} 称为色散项系数。设

$$u(x,t) = e^{\alpha t + ikx} \tag{3-1-4}$$

式中 k 为波数。上式代入(3-1-3)式得

$$\alpha = L(ik) + \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \nu_{2l} k^{2l} + i\sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \mu_{2m+1} k^{2m+1}$$

再代入(3-1-4)式得

$$u(x,t) = e^{L(ik)t + ikx} e^{\sum_{l=1}^{\infty}(-1)^l \nu_{2l} k^{2l} t} e^{i\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^m \mu_{2m+1} k^{2m+1} t} \tag{3-1-5}$$

上式中右端第一个指数因子是源方程的解，第二个指数因子表示耗散效应，第三个指数因子表示色散效应。

定义：若

$$\nu = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \nu_{2l} k^{2l} < 0 \tag{3-1-6}$$

则称差分方程(2-7-8)式是耗散的；若 $\nu > o$，则是逆耗散的。

若

$$\mu = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \mu_{2m+1} k^{2m+1} < 0 \tag{3-1-7}$$

则称差分方程(2-7-8)式是正色散的；若 $\mu > o$，则是负色散的。

在实际分析中，通常仅考虑小波数 k 的情况。在差分余项中，主要考虑最低阶偏导数项，把系数不为零的偶次最低阶项称为耗散主项，奇次最低阶项称为色散主项。设偶次最低阶为 $2L$ 阶，奇次最低阶为 $2M+1$ 阶，则上述定义可改为

若

$$(-1)^L \nu_{2L} < 0 \tag{3-1-8}$$

则差分方程(2-7-8)式是 $2L$ 阶耗散的。若大于 0，则是 $2L$ 阶逆耗散的。

若

$$(-1)^M \mu_{2M+1} < 0 \tag{3-1-9}$$

则差分方程(2-7-8)式是 $2M+1$ 阶正色散的，若大于 0，则是 $2M+1$ 阶负色散的。

3.3.2 差分方程的耗散性和色散性分析

对于差分方程来说，稳定性的必要条件是具有耗散性，即满足(3-1-8)式。另外，耗散主项

系数的绝对值$|\nu_{2L}|$应足够大。例如对于冲击波问题的差分方程来说,冲击波愈强,$|\nu_{2L}|$值应当愈大。再者,如果色散主项系数足够大,则差分方程的解在间断处易产生“高频振荡”,使得解的精度下降,严重时,会产生自激振荡使得计算无法进行下去,因此差分方程还应当保证$|\nu_{2L}|$大于$|\mu_{2M+1}|$。对于具有强色散项的差分方程是不可取的。为了尽量减小色散性,应当使$|\mu_{2M+1}|$小。一种方法是交替运用互反的色散性差分格式,使得在计算中互相抵消;另一种方法是构造两种同阶。互反的色散差分格式,相加得到色散性很小的差分格式。

§3.4 匀流方程差分格式的比较

匀流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0 \qquad a>0$$

的差分格式很多,从稳定性、耗散性、色散性和精度等方面的性质可以比较格式的优劣,并从中得到启示,应用于更复杂的差分方程。格式比较见表3-3-2,表中第一个格式是FTCS格式,耗散主项是

$$\nu_2=-\frac{ah}{2}c$$

式中

$$c=\frac{a\tau}{h}>0$$

表3-3-2 匀流方程差分格式的比较

序号	名称	差分格式	精度 τh	稳定条件	ν_2,ν_4	耗散条件	μ_3
1	FTCS	$\Delta_\tau u_j^n+a\delta_{2h}u_j^n=0$	1 2	恒不稳	$\nu_2=-\frac{1}{2}ahc$	逆耗散	$-\frac{1}{6}ah^2(1+2c^2)$
2	BTCS	$\nabla_\tau u_j^n+a\delta_{2h}u_j^n=0$	1 2	恒　稳	$\nu_2=\frac{1}{2}ahc$	恒耗散	$-\frac{1}{6}ah^2(1+2c^2)$
3	FTBS	$\Delta_\tau u_j^n+a\nabla_h u_j^n=0$	1 1	$c\leqslant1$	$\nu_2=\frac{1}{2}ah(1-c)$	$c<1$	$\frac{1}{6}ah^2(2c-1)(c-1)$
4	CTCS	$\delta_{2\tau}u_j^n+a\delta_{2h}u_j^n=0$	2 2	$c\leqslant1$	$\nu_2=\nu_4=0$		$-\frac{1}{6}ah^2(1-c^2)$
5	Lax	$\frac{u_j^{n+1}-\frac{1}{2}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)}{\tau}+a\delta_{2h}u_j^n=0$	1 2	$c\leqslant1$	$\nu_2=\frac{ah(1-c^2)}{2c}$	$c<1$	$\frac{1}{3}ah^2(1-c^2)$
	Lax-wendroff	$\Delta_\tau u_j^n+a\delta_{2h}u_j^n-\frac{a\tau}{2}\delta_h^2u_j^n=0$	2 2	$c\leqslant1$	$\nu_2=0$ $\nu_4=\frac{ah^3c(1-c^2)}{8}$	$c<1$	$-\frac{1}{6}ah^2(1-c^2)$

由(3-1-8)式得

$$(-1)^1\nu_2=\frac{1}{2}ahc$$

可见,不论c为任何值,上式均大于零,差分格式是逆耗散格式,是一个无条件不稳定格式。第2个格式则相反,无论c为任何值,(3-1-8)式均小于零,是耗散格式,是一个无条件稳定格式。

格式 3 至格式 6，从稳定性分析来看，都属于条件稳定格式，但是在实际计算中表明并不是令人满意的。格式 6 是全二阶精度格式，当 $c<1$ 时是耗散格式，但是其耗散主项是三阶小量和四阶偏导数；色散主项是二阶小量和三阶偏导数，大于耗散主项属于强色散格式。在计算到物理量激烈变化处（双曲型方程式经常出现），易产生振荡，因此格式 6 是难以实际应用的。至于格式 4，二阶和四阶偏导数项为零，格式呈极强的色散性，计算中更易产生振荡，因此不能实际使用。格式 5 当 $c<1$ 时是耗散格式，计算是稳定的，但是要注意耗散主式与 h 和 c 有关，当 h 较大或 c 较小时，耗散效应过强，会使解中参量突变处被过分抹平，影响解的真实性。

由上面分析可见，对于双曲型差分方程来说，常含有各种间断，为了稳定性，差分格式需要具有耗散性。这种由于差分余项产生的耗散称为格式耗散或格式粘性。计算要求格式耗散可调节，以适应不同程度的间断，还要求不能把突跃抹得太平。单纯应用格式耗散难以满足上述要求，于是出现了“人工粘性法”（将在下一节介绍）。进一步发展的方法致力于提高计算精度、清晰显示间断面、对差分格式的耗散性和色散性进行控制和调整、构造高阶精度和高分辨率格式，如通量修正输运方法 FCT（Flux Corrected Transport）和总变差递减方法 TVD（Total Variation Diminishing），将在第六章中介绍。

§3.5　拟线性双曲型方程

前面讨论的，都是针对常系数线性方程的。但是在爆炸力学中遇到的，一般都是非线性或拟线性的双曲型方程。应该指出，对于非线性（和拟线性）方程的差分格式的理论分析（包括稳定性和收敛性等），直到目前尚没有完善的理论。一般都是采用局部线性化方法（又叫第一变分方法）、冻结系数法等进行研究。

3.5.1　方程的形式

一阶偏微分方程可以写成

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\sum_{\alpha=1}^{d}\frac{\partial \boldsymbol{F}^{(\alpha)}}{\partial x_\alpha}=0 \tag{3-5-1}$$

式中

$$\boldsymbol{u}=(u_1,u_2\cdots\cdots,u_s)^T$$
$$\boldsymbol{F}^{(\alpha)}=(F_1^{(\alpha)},F^{(\alpha)}{}_2,\cdots\cdots F_s^{(\alpha)})^T$$
$$u_k=u_k(x_1,x_1\cdots,x_d,t)$$
$$F_k^{(\alpha)}=F_k^{(\alpha)}(x_1,x_2,\cdots,x_d,t,u_1,\cdots,u_s)$$

即 $\boldsymbol{u}$ 是 $\boldsymbol{x},t$ 的函数，$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_d)$。$\boldsymbol{F}^{(\alpha)}$是 $\boldsymbol{x},t,\ u$ 的函数，d 是维数，s 是方程的个数。

若 $F_k^{(\alpha)}$ 仅是 $\boldsymbol{u}$ 的函数，即

$$F_k^{(\alpha)}=F_k^{(\alpha)}(u_1,u_2,\cdots,u_s)$$

则(3-5-1)式可以写成

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\sum_{\alpha=1}^{d}A^{(\alpha)}\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x_\alpha}=0 \tag{3-5-2}$$

式中

$$A^{(\alpha)}=\frac{\partial(F_1^{(\alpha)},\cdots,F_s^{(\alpha)})}{\partial(u_1,\cdots,u_s)}=\begin{bmatrix}\frac{\partial F_1^{(\alpha)}}{\partial u_1} & \frac{\partial F_1^{(\alpha)}}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial F_1^{(\alpha)}}{\partial u_s}\\ \frac{\partial F_2^{(\alpha)}}{\partial u_1} & \frac{\partial F_2^{(\alpha)}}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial F_s^{(\alpha)}}{\partial u_s}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \frac{\partial F_s^{(\alpha)}}{\partial u_1} & \frac{\partial F_s^{(\alpha)}}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial F_s^{(\alpha)}}{\partial u_s}\end{bmatrix}$$

称为雅可比矩阵。注意，(3-5-2)式与

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}=\sum_{|\nu|\leqslant m}A_\nu(x,t)\frac{\partial^{\nu_1+\nu_2+\cdots+\nu_d}\boldsymbol{u}}{\partial x_1^{\nu_1}\partial x_2^{\nu_2}\cdots\partial x_d^{\nu_d}}$$

不同，上式是关于 $\boldsymbol{u}$ 的 m 阶偏微分方程组。而(3-5-2)式则是关于函数 $\boldsymbol{F}$ 的一阶偏微分方程组。

例 1 设 $s=2,d=2$，并设 $u_1=u,u_2=v,F_1=F,F_2=G$，由(3-5-2)式有

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial F^{(1)}}{\partial x_1}+\frac{\partial F^{(2)}}{\partial x_2}=0\\ \frac{\partial v}{\partial t}+\frac{\partial G^{(1)}}{\partial x_1}+\frac{\partial G^{(2)}}{\partial x_2}=0\end{aligned}\right\}$$

$$F=F(u,v),\frac{\partial F^{(1)}}{\partial x_1}=F_{x_1}^{(1)}=F_u^{(1)}u_{x_1}+F_v^{(1)}v_{x1}$$

于是方程组可以写成

$$\begin{cases}u_t+F_u^{(1)}u_{x_1}+F_v^{(1)}v_{x_1}+F_u^{(2)}u_{x_2}+F_v^{(2)}v_{x_2}=0\\ v_t+G_u^{(1)}u_{x_1}+G_v^{(1)}v_{x_1}+G_u^{(2)}u_{x_2}+G_v^{(2)}v_{x_2}=0\end{cases}$$

用矩阵形式表示出来就是

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}F_u^{(1)} & F_v^{(1)}\\ G_u^{(1)} & G_v^{(1)}\end{bmatrix}\frac{\partial}{\partial x_1}\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}F_u^{(2)} & F_v^{(2)}\\ G_u^{(2)} & G_v^{(2)}\end{bmatrix}\frac{\partial}{\partial x_2}\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix}=0$$

最后可以写成

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix}+\frac{\partial(F^{(1)},G^{(1)})}{\partial(u,v)}\frac{\partial}{\partial x_1}\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix}+\frac{\partial(F^{(2)},G^{(2)})}{\partial(u,v)}\frac{\partial}{\partial x_2}\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix}=0$$

例 2 $s=1,d=3$，由(3-5-2)式

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{\partial F^{(\alpha)}}{\partial x_\alpha}=\frac{\partial u}{\partial t}++\frac{\partial F^{(1)}}{\partial x_1}+\frac{\partial F^{(2)}}{\partial x_2}+\frac{\partial F^{(3)}}{\partial x_3}=0$$

可以写成

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\mathrm{div}\boldsymbol{F}=0$$

例 3 一维无粘理想流体力学方程

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})}{\partial x}=0$$

其中

$$\boldsymbol{u}=(\rho,\rho u,e)^t$$

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})=(\rho u,\rho u^2+p,u(e+p))^T$$

对比(3-5-2)式可知，此时 $d=1,s=3$。

在(3-5-2)式中，$A^{(\alpha)}$ 为 $s\times s$ 阶雅柯比矩阵，若在定义域内的每一点上，$A^{(\alpha)}$ 均有 s 个互异的实特征值，则(3-5-2)式为严格的双曲型方程。

若 $A^{(\alpha)}$ 是常数矩阵，则得到一个常系数线性双曲型的方程组。

若 $A^{(\alpha)}=A^{(\alpha)}(x,t)$，则是变系数线性双曲型方程。

若 $A^{(\alpha)}=A^{(\alpha)}(x,t,u)$，则是拟线性的双曲型方程。

若 $A^{(\alpha)}=A^{(\alpha)}(x,t,u,\frac{\partial u}{\partial x})$，则为非线性的双曲型方程。

3.5.2 古典解与无解区

由微分方程得到的连续、可微解，常称为古典解。但是对于拟线性方程，常常会导致非古典解(广义解)或者在解域中无解。下面来看几个例于。

一维方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f(u)}{\partial x}=0 \tag{3-5-3}$$

$$u(x,0)=v(x)$$

方程第 2 项可以写为

$$\frac{\partial f(u)}{\partial x}=\frac{\partial f(u)}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}=a(u)\frac{\partial u}{\partial x}$$

式中

$$a(u)=\frac{\partial f(u)}{\partial u}$$

于是方程就可以写成

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a(u)\frac{\partial u}{\partial x}=0$$

这样，沿着特征线

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=a(u)$$

有

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=0$$

积分得

$$u(x,t)=\text{const}$$

在 x-t 平面上一点 (x_0,t_0)，如果通过该点有一条且仅有一条特征线通过，且与 $t=0$ 交于 $(x_1,0)$ 点，则有

$$u(x_0,t_0)=v(x_1)$$

即解是唯一的。如果求解区域内任一点没有或者有多于一条特征线，则该区域内无古典解。

再看匀流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0$$

初始条件是间断的

$$u(x,0)=\begin{cases}1 & , \quad x\geqslant 0\\ -1 & , \quad x<0\end{cases}$$

特征线为

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=a$$

积分求得过(x_0,t_0)点的特征线方程为

$$x=x_0+a(t-t_0)$$

或 $x-at=x_0-at_0$

该特征线与$t=0$相交于$(x_0-at_0,0)$点，于是由初始条件得

$$u(x_0,t_0)=\begin{cases}1 & x_0-at_0\geqslant 0\\ -1 & x_0-at_0<0\end{cases}$$

所以满足初始条件的解为(见图 3-5-1)

$$u=\begin{cases}1 & x-at\geqslant 0\\ -1 & x-at<0\end{cases}$$

可见，常系数双曲型方程(匀流方程)当初始条件间断时，其解存在，其解也是间断的。

下面再看拟线性的情况。给出一维方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}=0 \qquad (3\text{-}5\text{-}4)$$

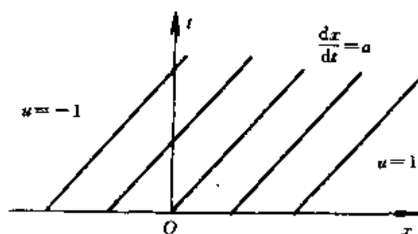


图 3-5-1 初始条件间断的匀流方程的特征线

也可以写成

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2}u^2\right)=0$$

这相当于 $F(u)=\frac{1}{2}u^2$

初始条件仍为

$$u(x,0)=\begin{cases}1, & x\geqslant 0\\ -1, & x<0\end{cases} \qquad (3\text{-}5\text{-}5)$$

其解为

沿着 $\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=u$

有 $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=0$

沿特征线u为常数，则

$$x-x_0=u(t-t_0)$$

即 $x-ut=x_0-ut_0$

得解为

$$u(x,t)=\begin{cases}1, & x-ut=x-t\geqslant 0\\ -1, & x-ut=x+t<0\end{cases}$$

从图 3-5-2 可见，出现了没有特征线通过的Ω_2区，即无解区。

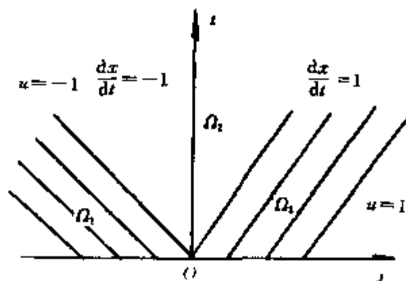


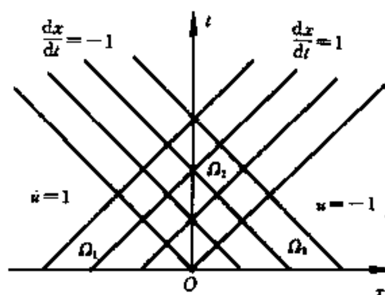
图 3-5-2 拟线性双曲型方程的特征线之一

如果初始条件为

$$u(x,0)=\begin{cases}-1, & x\geqslant 0\\ 1, & x<0\end{cases} \qquad (3\text{-}5\text{-}6)$$

解为

$$u(x,t)=\begin{cases}-1, & x+t\geqslant 0\\ 1, & x-t<0\end{cases}$$



3-5-3 拟线性双曲型方程的特征线之二

见图 3-5-3，在 Ω_2 区内每一点有两条特征线通过，不是唯一解，所以这个区域也是无解区。这是初始条件存在强间断引起的，而对于有些双曲型方程，即使是初始条件很光滑，也会在解中产生无解区。

3.5.3 弱解

上面出现的无解区说明，原来的古典解已不能应用，但是从物理的角度上讲，问题的解总是客观存在的。事实上，人们也找出了一些强约束条件下的解（例如间断解），这就是下面讲到的弱解或者广义解。

定义：设 Ω 为 (x,t) 平面上的一个区域，Ω 被有限制条曲线 $\Gamma_i(i=1,2,\cdots,I)$ 分割为有限个子区域 $\Omega_j(j=1,2,\cdots,J)$，$u(x,t)$ 在称为 Ω 上的一个块块连续可微的函数，系指 $u(x,t)$ 在每个子区域 Ω_j 内连续可微，而仅在 Γ_i 上是间断的。

在块块连续可做函数类中，我们给出方程

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f(u)}{\partial x}&=0\\ u(x,0)&=v(x)\end{aligned}\tag{3-5-3}$$

的弱解的三种定义，它们彼此等价。

定义 Ⅰ：若在上半平面 $t\geqslant 0$ 上的任何一条与 $u(x,t)$ 的间断线只相交有限个点的闭回路 ∂D 上，$u(x,t)$ 满足积分关系式

$$\int_{\partial D} u\mathrm{d}x-f(u)\mathrm{d}t=0\tag{3-5-7}$$

则 $u(x,t)$ 是方程(3-5-3)式的弱解。

在源方程的连续区域内不必定义弱解，但弱解定义Ⅰ式应适用于连续区，这一点证明如下。

设在 D 区域内 $u(x,t)$ 连续可微，取域 $D^*\subset D$，其边界为 ∂D^*，设 u 是弱解，由(3-5-7)式得

$$\int_{\partial D^*} u\mathrm{d}x-f\mathrm{d}t=0$$

因为函数连续可微，由格林公式得

$$-\iint_{D^*}\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t=0\tag{3-5-8}$$

由于 D^* 是 D 的任意一个子区域，所以有

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}=0$$

由此证明了弱解适合源方程(3-5-3)式，即在连续区是适合的。

再证，若 $u(x,t)$ 是古典解，则有

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}=0$$

对于任意的子区域 $D^*\subset D$ 都有

$$\iint_{D^*}\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t=0$$

由于函数在 D^* 域连续可微，由格式公式得

$$-\int_{\partial D^*}u\mathrm{d}x-f\mathrm{d}t=0$$

这就是(3-5-7)式，所以弱解条件Ⅰ在连续区成立。

定义Ⅱ：如果块块连续可微函数 $u(x,t)$ 在光滑区内满足

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}=0$$

在间断线 $x=\xi(t)$ 上有下式成立

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}=\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}\tag{3-5-9}$$

则 $u(x,t)$ 为方程(3-5-3)式的弱解。

现证明定义Ⅱ和定义Ⅰ等价。

设在 x-t 空间，u 的间断线为 $x=\xi(t)$，在线上 t_0 点周围作闭回路包围 t_0 点，见图(3-5-4)。

$x=\xi(t)+\varepsilon$　　①

$t=t_0+\delta$　　②

$x=\xi(t)-\varepsilon$　　③

$t=t_0-\delta$　　④

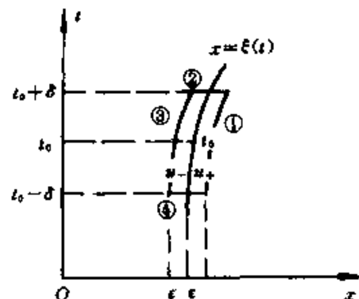


图 3-5-4　弱解定义Ⅱ和Ⅰ等价的证明

由(3-5-7)式得

$$\int_{t_0-\delta}^{t_0+\delta}\left\{u(\xi(t)+\varepsilon,t)\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}-f[u(\xi(t)+\varepsilon,t)]\right\}\mathrm{d}t$$
$$+\int_{\xi(t_0-\delta)+\varepsilon}^{\xi(t_0+\delta)-\varepsilon}u\mathrm{d}x+\int_{t_0+\delta}^{t_0-\delta}\left\{u(\xi(t)-\varepsilon,t)\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}-f[u(\xi(t)-\varepsilon,t)]\right\}\mathrm{d}t$$
$$+\int_{\xi(t_0-\delta)-\varepsilon}^{\xi(t_0+\delta)+\varepsilon}u\mathrm{d}x=0$$

当 $\varepsilon\to0$ 时，

$$\int_{t_0-\delta}^{t_0+\delta}\left[u^+\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}-f(u^+)\right]\mathrm{d}t-\int_{t_0-\delta}^{t_0+\delta}\left[u^-\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}-f(u^-)\right]\mathrm{d}t=0$$

$$\int_{t_0-\delta}^{t_0+\delta}\left[(u^+-u^-)\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}-(f(u^+)-f(u^-))\right]\mathrm{d}t=0$$

于是

$$(u^+-u^-)\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}-(f(u^+)-f(u^-))=0$$

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}=\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}$$

同样也可以由(3-5-9)式推导出(3-5-7)式，这样就证明了这两式是等价的。

定义Ⅲ：设 Φ 是试验函数 $\varphi(x,t)$ 的集合，设 $\varphi(x,t)$ 是连续可微函数，且仅在 $t\geqslant0$ 上的某一个有界区域 D 内及边界 ∂D 与 $t=0$ 线重合的一段上不为零(见图 3-5-5)。如果块块连续可微

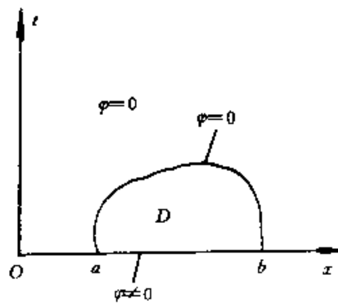


图 3-5-5 弱解定义Ⅱ示意图

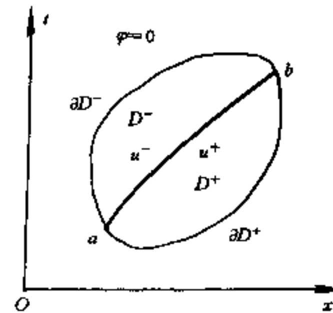


图 3-5-6 弱解定义Ⅱ和Ⅰ等价的证明

函数 $u(x,t)$ 满足下式

$$\iint_{t\geqslant 0}\left(u\frac{\partial\varphi}{\partial t}+f\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x,0)v(x)\mathrm{d}x=0 \tag{3-5-10}$$

$$\forall\ \varphi\in\Phi$$

则 $u(x,t)$ 是方程(3-5-3)式的弱解。

现证明这样定义的弱解在连续区就是古典解，即满足微分方程(3-5-3)式。设 $u(x,t)$ 在 D 域内连续可微，则对于任意的子域 $E\varphi\subset D$ 的试验函数 $\varphi\in\Phi$，$u(x,t)$ 满足(3-5-10)式

$$\iint_{E\varphi}\left(u\frac{\partial\varphi}{\partial t}+f\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x,0)v(x)\mathrm{d}x=0$$

或

$$\iint_{E\varphi}\left(\frac{\partial u\varphi}{\partial t}+\frac{\partial f\varphi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t-\iint_{E\varphi}\varphi\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x,0)v(x)\mathrm{d}x=0 \tag{3-5-10a}$$

上式第一项由格林公式及边界仅在 x 轴上不为零，且等于初值，$v(x)$，得

$$-\int_{\partial E\varphi}\varphi(u\mathrm{d}x-f\mathrm{d}t)=-\int_{\partial E\varphi}\varphi(x,0)v(x)\mathrm{d}x$$

上式中 ∂E_φ 为 E_φ 的边界，在 x 轴上 $f\mathrm{d}t$ 为零。(3-5-10a)式中第三项的积分限虽然是从 $-\infty$ 到 ∞，但是仅在 ∂E_φ 上不为零，因此和(3-5-10a)式中第一项消去，得

$$\iint_{E\varphi}\varphi\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t=0$$

由于 E_φ 是 D 域内的任意子域，故有

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}=0$$

于是证明了 $u(x,t)$ 就是古典解。

再证在间断处定义Ⅱ和定义Ⅰ等价，见图(3-5-6)。设在 D 域内以 $x=\xi(t)$（图中 ab 线）表示间断，为简单起见，不考虑初始条件，即所取的 D 域与 x 轴相交，则(3-5-10)式中第二项为零。

$$\iint_{D^-}\left(u\frac{\partial\varphi}{\partial t}+f\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t+\iint_{D^+}\left(u\frac{\partial\varphi}{\partial x}+f\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t=0$$

函数在 D^-，D^+ 域内连续可微，所以

$$\iint_{D^-}\left[\frac{\partial(\varphi u)}{\partial t}+\frac{\partial(\varphi f)}{\partial x}-\varphi\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}\right)\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}t$$
$$+\iint_{D^+}\left[\frac{\partial(\varphi u)}{\partial t}+\frac{\partial(\varphi f)}{\partial x}-\varphi\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}\right)\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}t=0$$

利用格林公式

$$\oint_l X\mathrm{d}x+Y\mathrm{d}y=\iint_D\left(\frac{\partial Y}{\partial x}-\frac{\partial x}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

改为线积分

$$-\int_{\partial D^-}(\varphi u\mathrm{d}x-\varphi f\mathrm{d}t)+\int_{ab(-)}\varphi(u\mathrm{d}x-f\mathrm{d}t)$$
$$-\int_{\partial D^+}(\varphi u\mathrm{d}x-\varphi f\mathrm{d}t)-\int_{ab(+)}\varphi(u\mathrm{d}x-f\mathrm{d}t)=0$$

因为在 D 域边界上 $\varphi=0$，仅在 ab 上不等于零，故式中第一和第三项均等于零。D^- 域内沿 ab 线积分，则 u 为 u^-。D^+ 域内沿 ab 线积分，u 为 u^+。而 $x=\xi(t)$，故

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}$$

故上式成为

$$\int_{ab}\varphi\left[(u^+-u^-)\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}-(f(u^+)-f(u^-))\right]\mathrm{d}t=0$$

由于 ab 可以是间断线上的任意一段，所以在整个间断线上有

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}=\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}$$

这就是(3-5-9)式。用类似的方法可以从定义Ⅰ推导出定义Ⅱ。

需要指出的是，在弱解的三种定义中避开了 u 和 f 对 x 和 t 的导数，而是用函数本身来定义解的。

弱解不一定是唯一的，现举例说明如下。仍用(3-5-4)式

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}=0 \tag{3-5-4}$$

$$u(x,0)=\begin{cases}-1 & x\geqslant 0\\ 1 & x<0\end{cases} \tag{3-5-6}$$

前面已经得到它的一个解为

$$u(x,t)=\begin{cases}-1 & x-t\geqslant 0\\ 1 & x+t<0\end{cases}$$

Ω_2 为无解区。现取解为(见图 3-5-7)

$$u(x,t)=\begin{cases}1 & x\leqslant\frac{1}{2}(1-a)t\\ -a & \frac{1}{2}(1-a)t<x\leqslant 0\\ a & 0<x\leqslant\frac{1}{2}(a-1)t\\ -1 & \frac{1}{2}(a-1)t<x\end{cases}$$

$1 \leqslant a \leqslant 3$

$a=3$ 时，①、④线重合，③、⑤线重合。

$a=1$ 时，①、②、③重合。

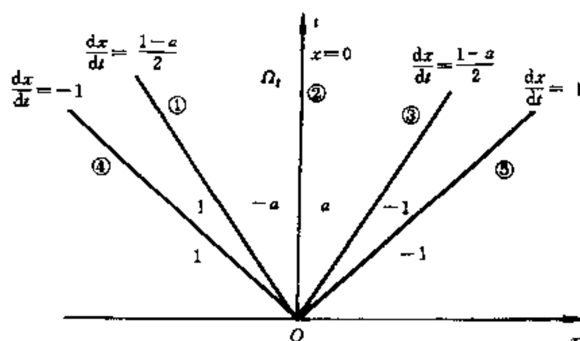


图 3-5-7 解(3-5-12)的 x-t 图

现有三条间断线

① $\quad \dfrac{x}{t}=\dfrac{1-a}{2}$

② $\quad x=0$

③ $\quad \dfrac{x}{t}=\dfrac{a-1}{2}$

若间断线上(3-5-9)式成立，则解为弱解。现

$$f=\frac{1}{2}u^2$$

对于间断线①有

$$x=\frac{1-a}{2}t, \quad \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}=\frac{1-a}{2}$$

$$u^-=1 \quad , \quad u^+=-a$$

$$\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}=\frac{\frac{1}{2}a^2-\frac{1}{2}}{-a-1}$$

$$=\frac{1}{2}(1-a)=\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}$$

符合(3-5-9)式。

对于间断线②有

$$x=0 \quad , \quad \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}=0$$

$$u^-=-a \quad , \quad u^+=a$$

$$\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}=\frac{\frac{1}{2}a^2-\frac{1}{2}a^2}{a+a}=0=\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}$$

符合(3-5-9)式。同理，间断线③也符合(3-5-9)式，说明 u 是弱解。

a 可以取 $1 \leqslant a \leqslant 3$ 间的任何值，故弱解有无穷个，由例可见，在古典解不存在区域内存在

弱解，弱解不一定是唯一解。

3.5.4 弱解唯一的条件

一、熵条件

对于初值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}=0 \tag{3-5-3}$$

$$u(x,0)=w(x)$$

设有两个弱解 $u(x,t)$ 和 $v(x,t)$，以 $H(t)$ 表示 u-v 在 L_1 函数空间的范数，则

$$H(t)=\int_{-\infty}^{\infty}|u(x,t)-v(x,t)|\mathrm{d}x=\|u(x,t)-v(x,t)\|_{L_1}$$

如果 u 和 v 仅在有限个点上不相等，则有 $H(t)=0$。下面找使 $H(t)=0,t>0$ 的条件。现作讨论如下：

①因为初始条件为同一个，弱解 u、v 的初值均为 $W(x)$。故

$$H(0)=0$$

②因为是绝对值积分，恒大于零，则

$$H(t)\geqslant 0$$

③若能得到

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\leqslant 0$$

则必有 $H(t)=0$。下面来讨论 $\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\leqslant 0$ 的条件。

为了计算，首先要化去绝对值号

$$|u-v|=\begin{cases}(u-v) & u\geqslant v\\ -(u-v) & u<v\end{cases}$$

引进一组曲线

$$x=y_1(t)$$

$$x=y_2(t)$$

$$\cdots\cdots$$

$$x=y_m(t)$$

$$\cdots\cdots$$

$$x=y_n(t)$$

使 u-v 在曲线两侧变号，得下式

$$|u-v|=(-1)^m(u-v),\qquad y_m(t)<x<y_{m+1}(t)$$

在此区间内，若 $u>v$，则 m 为偶数；若 $u<v$，则 m 为奇数。则 $H(t)$ 可表示为

$$H(t)=\sum_m\int_{y_{m(t)}}^{y_{m+1}(t)}(-1)^m(u-v)\mathrm{d}x$$

$$\frac{\mathrm{d}H(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_m(-1)^m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{y_{m(t)}}^{y_{m+1}(t)}(u-v)\mathrm{d}x \tag{3-5-11}$$

这样就把绝对值积分化为非绝对值的普通积分了。分两种情况讨论：

(1)在 $x=y_m(t)$ 线上，若 u、v 都连续，由于定义过 $y_m(t)$ 后，$u-v$ 要变号，则 u、v 必在 $y_m(t)$ 线上相交，见图 3-5-8，故

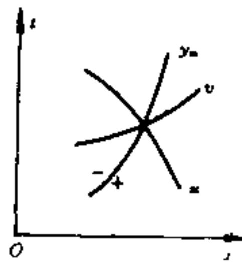
$$u=v$$

表明在此条件下，弱解是唯一的，不在本讨论范围内。

(2) 在 $x=y_m(t)$ 线上 u 间断，v 连续则

①$u_m^->v>u_m^+$，则 m 为奇数，见图 3-5-9。

②$u_m^-<v<u_m^+$，则 m 为偶数，见图 3-5-10。



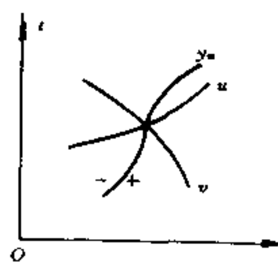


图 3-5-8 在 $x=y_m(t)$ 上 u、v 都连续

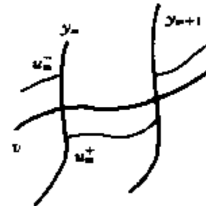


图 3-5-9 在 $x=y_m(t)$ 上 u 间断，v 连续之一

在①中又可能有如下情况，在 $y_m<x<y_{m+1}$ 区间内，v 连续，u 间断，但 $u-v$ 不能反号。设 u 在 $x=z(t)$ 线上间断，见图 3-5-11，得下式

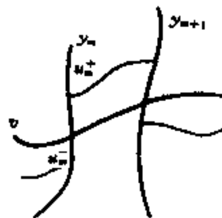


图 3-5-10 在 $x=y_m(t)$ 上 u 间断，v 连续之二

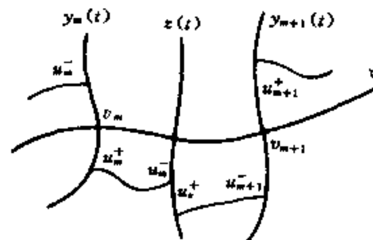


图 3-5-11 在 $x=y_m(t)$ 上 u 间断，v 连续之三

$$\frac{d}{dt}\int_{y_m}^{y_{m+1}}(u-v)\mathrm{d}x=\frac{d}{\mathrm{d}t}\int_{y_m}^{z}u\mathrm{d}x+\frac{d}{\mathrm{d}t}\int_{z}^{y_{m+1}}u\mathrm{d}x-\frac{d}{\mathrm{d}t}\int_{y_m}^{y_{m+1}}v\mathrm{d}x \tag{3-5-12}$$

由 (3-5-12) 式右边第一项

$$\frac{d}{\mathrm{d}t}\int_{y_m(t)}^{z(t)}u(x,t)\mathrm{d}x=\int_{y_m}^{z}\frac{\partial u}{\partial t}\mathrm{d}x+u[z(t),t]\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}-u(y_m(t),t)\frac{\mathrm{d}y_m}{\mathrm{d}t}$$

$$=-\int_{y_m}^{z}\frac{\partial f(u)}{\partial x}\mathrm{d}x+u_z^-\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}-u_m^+\frac{\mathrm{d}y_m}{\mathrm{d}t}$$

上式用到了 (3-5-3) 式关系，(3-5-12) 式右边三项按上式计算得

$$\frac{d}{\mathrm{d}t}\int_{y_m}^{y_{m+1}}(u-v)\mathrm{d}x=\int_{y_m}^{z}\frac{\partial u}{\partial t}\mathrm{d}x+u_z^-\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}-u_m^+\frac{\mathrm{d}y_m}{\mathrm{d}t}+\int_{z}^{y_{m+1}}\frac{\partial u}{\partial t}\mathrm{d}x+u_{m+1}^-\frac{\mathrm{d}y_{m+1}}{\mathrm{d}t}$$

$$
-u_z^+\frac{dz}{dt}-\int_{y_m}^{y_{m+1}}\frac{\partial v}{\partial t}dx-v_{m+1}^-\frac{dy_{m+1}}{dt}+v_m^+\frac{dy_m}{dt}
$$

$$
=-\int_{y_m}^{z}\frac{\partial f(u)}{\partial x}dx-\int_{z}^{y_{m+1}}\frac{\partial f(u)}{\partial x}dx+\int_{y_m}^{y_{m+1}}\frac{\partial f(v)}{\partial x}dx
$$

$$
-(u_z^+-u_z^-)\frac{dz}{\partial x}-(u_m^+-v_m^+)\frac{dy_m}{dt}(u_{m+1}^--v_{m+1}^-)\frac{dy_{m+1}}{dt}
$$

$$
=-[f(u_z^-)-f(u_m^+)]-[f(u_{m+1}^-)-f(u_z^+)]
$$

$$
+[f(v_{m+1}^-)-f(v_m^+)]-(u_z^+-u_z^-)\frac{dz}{dt}-(u_m^+-v_m^+)\frac{dy_m}{dt}
$$

$$
+(u_{m+1}^--v_{m+1}^-)\frac{dy_{m+1}}{dt}
$$

式中所有的带 z 项，由（3-5-9）式知总和为零，上式成为

$$
\frac{d}{dt}\int_{y_m}^{y_{m+1}}(u-v)dx=\left[f(u_m^+)-f(v_m^+)-(u_m^+-v_m^+)\frac{dy_m}{dt}\right]
$$

$$
-\left[f(u_{m+1}^-)-f(v_{m+1}^-)-(u_{m+1}^--v_{m+1}^-)\frac{dy_{m+1}}{dt}\right]
$$

$$
=G_m^+-G_{m+1} \tag{3-5-13}
$$

讨论：

①（3-5-13）式中不包括含 z，可见在 y_m 和 y_{m+1} 线之间，不论 u 是否有间断，只要 $u-v$ 不反号，关系（3-5-13）仍然成立；

②因此只要研究 y_m 是 u 的间断线的情况就可以了，也就是说把 u 作为块块连续可微函数类研究；

③上面推导（3-5-13）式时，是 $u_m^- v u_m^+$ 情况，对于 $u_m^- v u_m^-$ 可以得到同样结果。

可见（3-5-13）代表了各种可能情况，将其代入（3-5-11）式得

$$
\frac{dH(t)}{dt}=\sum_m(-1)^m(G_m^+-G_{m+1}^-)
$$

因为 v 是连续的，所以 $v^+=v^-=v$，（3-5-13）式中定义的 G^+ 和 G^-，由（3-5-9）式可推导得如下结果

$$
G^-=f(u^+)-f(v)-[f(u^+)-f(u^-)]-(u^--v)\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}
$$

$$
=f(u^+)-f(v)-\left[1+\frac{u^--v}{u^+-u^-}\right][f(u^+)-f(u^-)]
$$

$$
=(u^+-v)\left[\frac{f(u^+)-f(v)}{u^+-v}-\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-v^-}\right]
$$

$$
=(u^+-v)I
$$

$$
G^+=f(u^+)-f(v)-(u^+-v)\frac{dy}{dt}
$$

$$
=f(u^+)-f(u^-)-[f(v)-f(u^-)]-(u^+-v)\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}
$$

$$= [f(u^+) - f(u^-)][1 - \frac{u^+ - v}{u^+ - u^-}] - [f(v) - f(u^-)]$$

$$= [f(u^+) - f(u^-)]\frac{v - u^-}{u^+ - u^-}] - [f(v) - f(u^-)]$$

$$= (v - u^-)\left[\frac{f(u^+) - f(u^-)}{u^+ - u^-} - \frac{f(v) - f(u^-)}{v - u^-}\right]$$

$$= (v - u^-)K$$

参阅图 3-5-12，得

$$(u^+ - v)_m \begin{cases} \leqslant 0 & m \text{ 为奇数} \\ \geqslant 0 & m \text{ 为偶数} \end{cases}$$

$$(v - u^-)_m \begin{cases} \leqslant 0 & m \text{ 为奇数} \\ \geqslant 0 & m \text{ 为偶数} \end{cases}$$

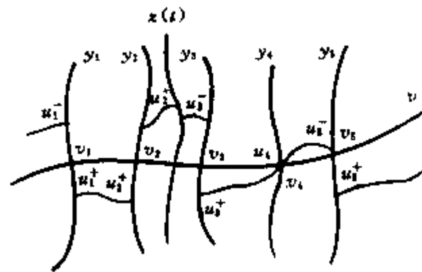


图 3-5-12 在 $x=y_m(t)$ 上 u 间断，v 连续之四

(3-5-11) 式展开为

$$\frac{\mathrm{d}H(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_m (-1)^m [G_m^+ - G_{m+1}^-]$$

$$= \sum_m (-1)^m [(v - u^-)_m k_m - (u^+ - v)_{m+1} I_{m+1}] \qquad (3\text{-}5\text{-}14)$$

因为

$$(-1)^m (v - u^-)_m \geqslant 0$$

$$(-1)^m (u^+ - v)_{m+1} \leqslant 0$$

所以当

$$K_m \leqslant 0$$

$$I_m \leqslant 0$$

时有

$$\frac{\mathrm{d}H(t)}{\mathrm{d}t} \leqslant 0$$

由 K_m 和 I_m 定义得

$$\frac{f(u^+) - f(v)}{u^+ - v} - \frac{f(u^+) - f(u^-)}{u^+ - v^-} \leqslant 0$$

$$\frac{f(u^+) - f(u^-)}{u^+ - u^-} - \frac{f(v) - f(u^-)}{v - u^-} \leqslant 0$$

合并得

$$\frac{f(u^+) - f(v)}{u^+ - v} \leqslant \frac{f(u^+) - f(u^-)}{u^+ - v^-} \leqslant \frac{f(u^-) - f(v)}{u^- - v} \qquad (3\text{-}5\text{-}15)$$

这就是当 $t>0$ 时 $H(t)\equiv 0$ 的条件，也是保证弱解唯一的充分条件。(3-5-15) 式称为熵条件，是原苏联学者 О. А. Олейник 在 1959 年提出的。并证明了对于一维拟线性双曲线型方程 (3-5-

4）式，满足熵条件时，有唯一的弱解存在。

二、熵条件的直观解释

由（3-5-9）式

$$\frac{d\xi}{dt}=\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}=\mathscr{S}$$

表示的是间断传播的速度。v 为 u^+,u^- 之间的值，$v\in[\min(u^+,u^-),\max(u^+,u^-)]$。当 $v\to u^+$ 时

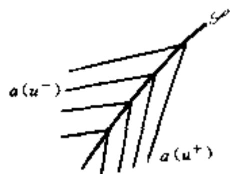
$$\frac{f(u^+)-f(v)}{u^+-v}\to\frac{df(u^+)}{du}=f'(u^+)=a(u^+)$$

同理，当 $v\to u^-$ 时，

$$\frac{f(u^-)-f(v)}{u^--v}\to\frac{df(u^-)}{du}=f'(u^-)=a(u^-)$$

于是得

$$a(u^-)\geqslant\mathscr{S}\geqslant a(u^+) \tag{3-5-16}$$



3-5-13 熵条件的直观解释

式中 a 是扰动传播的速度。从力学意义上讲，是音速。由上式可得间断传播的速度 $\mathscr{S}$ 对波前是超音速的，对波后是亚音速的。见图 3-5-13，波前和波后的特征线汇聚成间断，这就是激波。过激波后熵增加，故称熵条件。

三、熵条件的几何解释

当 $u^-<v<u^+$ 时，由(3-5-15)式

$$f(u^+)-f(v)\leqslant\frac{f(u^+)-f(u^-)}{u^+-u^-}(u^+-v)$$

$$f(v)\geqslant(1-\frac{u^+-v}{u^+-u^-})f(u^+)+\frac{u^+-v}{u^+-u^-}f(u^-)$$

$$f(v)\geqslant\frac{v-u^-}{u^+-u^-}f(u^+)+\frac{u^+-v}{u^+-u^-}f(u^-)=G(v)$$

在 v-f 平面上作 ab 线，a 点为 $v=u^-$，b 点为 $v=u^+$，而 $v\in(u^-,u^+)$。ab 线是一条直线，代表 $f(v)=G(v)$情况，见图 3-5-14。对于 $f(v)>G(v)$情况，v-f 曲线应在 ab 直线上方，如果 f 的二阶导数 f'' 在 a，b 区间不变号，则 f 一定是凸函数，即有 $f''<0$，或

$$a(u)=f'$$

是减函数。

当 $u^+<v<u^-$ 时

$$f(v)\leqslant\frac{u^+-v}{u^+-v^-}f(u^-)+\frac{v-u^-}{u^--u^-}f(u^+)=G(v)$$

在 v-f 平面上，作 ab 线，见图 3-5-15，ab 线代表 $f(v)=G(v)$情况，对于 $f(v)<G(v)$情况 v-f 曲线应在 ab 线下方，因此，若 f'' 在 ab 区间不变号，则 f 一定是凹函数，即 $f''>0$，于是 $a(u)$应是增函数。

再作如下推论：

若 $f''<0$，a 是减函数，由（3-5 16）式有

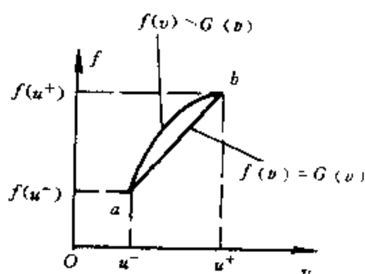


图 3-5-14　熵条件的几何解释之一

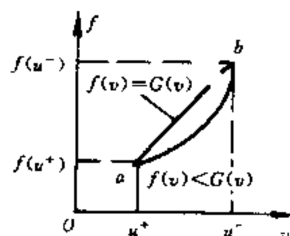


图 3-5-15　熵条件的几何解释之二

$$a(u^-) \geqslant \mathscr{S} \geqslant a(u^+)$$

即

$$a(u^+) \leqslant a(u^-)$$

因为 a 是减函数，所以

$$u^+ > u^-$$

即熵条件是

$$u^+ > u^-$$

若 $f'' > 0$，则

$$a(u^+) \leqslant a(u^-)$$

a 是增函数，所以有 $u^+ < u^-$，即熵条件是

$$u^+ < u^-$$

例：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(\frac{1}{2}u^2)}{\partial x} = 0 \tag{3-5-4}$$

$$u(x,0) = \begin{cases} -1 & , \quad x \geqslant 0 \\ 1 & , \quad x < 0 \end{cases} \tag{3-5-6}$$

$$f(u) = \frac{1}{2}u^2$$

$$f''(u) = 1 > 0$$

熵条件是

$$u^+ < u^-$$

对于图 3-5-16 中的①，③线符合熵条件 $u^+<u^-$，本问题的唯一解是

$$u(x,t) = \begin{cases} -1 & , \quad x \geqslant 0 \\ 1 & , \quad x < 0 \end{cases}$$

即 $a=1$，三条特征线并成一条，符合熵条件。若初始条件为

$$u(x,0) = \begin{cases} 1 & , \quad x \geqslant 0 \\ -1 & , \quad x < 0 \end{cases} \tag{3-5-5}$$

则不能满足熵条件，没有间断解，因为不存在$u^-<u^+$的可能性，实际上弱解是一束中心稀疏波，也是唯一解，但不能由熵条件得到（见图 3-5-17）。

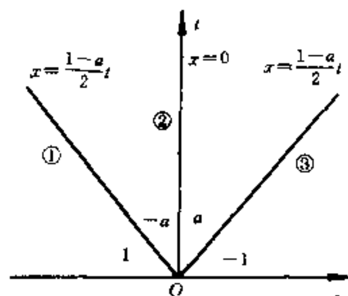


图 3-5-16 公式（3-5-4）和（3-5-6）的解

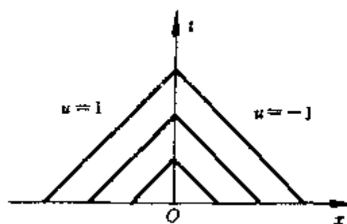


图 3-5-17 公式（3-5-4）和（3-5-5）的解

3.5.5 方程组的熵条件

关于一般微分方程组的熵条件问题至今尚未解决。在这方面一些学者做了不少工作，下面对 Lax 的工作作一简单介绍。

一维一阶偏微分方程组

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f(u)}{\partial x}=0$$

其中

$$u=(u_1,\ u_2,\ \cdots,\ u_s)^T$$

$$f=(f_1,\ f_2,\ \cdots,\ f_s)^T$$

方程可以写成

$$\frac{\partial u}{\partial t}+A(u)\frac{\partial u}{\partial x}=0$$

其中

$$A=\frac{\partial\ (f_1,\ f_2,\ \cdots,\ f_s)}{\partial\ (u_1,\ u_2,\ \cdots,\ u_s)}$$

为雅可比矩阵。若 A 有 s 个互异的实特征值 λ_1，λ_2，…，λ_s，则方程组为严格双曲型方程组。将特征值按其大小次序排列为

$$\lambda_1(u)<\lambda_2(u)<\cdots<\lambda_k(u)<\cdots<\lambda_s(u)$$

特征线方程为

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\lambda_k(u)\quad,\quad 1\leqslant k\leqslant s$$

1957 年 Lax 提出：设微分方程的解在 $x=\xi(t)$上间断

$$\mathscr{S}=\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}$$

若有 k 值，使得不等式

$$\begin{aligned}&\lambda_k(u^-)>\mathscr{S}>\lambda_{k-1}(u^-)\\&\lambda_{k+1}(u^+)>\mathscr{S}>\lambda_k(u^+)\end{aligned}\tag{3-5-17}$$

成立，则间断 $x=\xi(t)$就是力学意义上的激波。由上面条件可得

$$\mathscr{S}<\lambda_k(u^-)<\lambda_{k+1}(u^-)<\cdots<\lambda_s(u^-)$$

共有 $s-(k-1)$ 条特征线在间断左边，赶上激波。

$$\lambda_1(u^+)<\lambda_2(u^+)<\cdots<\lambda_k(u^+)<\mathscr{S}$$

共有 k 条特征线在间断右边，速度比激波慢，被激波赶上，见图 3-5-18。

特征线有 $s-(k-1)+k=s+1$ 条，即 $s+1$ 方程。由（3-5-9）式

$$\mathscr{S}=\frac{f_i(u^+)-f_i(u^-)}{u^+-u^-}\quad,\quad 1\leqslant i\leqslant s$$

有 s 个方程，共 $2s+1$ 个方程。要求的参量有

$$\begin{array}{ll} u^+=(u_1^+,u_2^+,\cdots,u_s^+) & s\text{ 个} \\ u^-=(u_1^-,u_2^-,\cdots,u_s^-) & s\text{ 个} \\ \mathscr{S} & 1\text{ 个} \end{array}$$

图 3-5-18 Lax 对于激波的解释

共有 $2s+1$ 个，正好等于方程数，解是唯一的。但是理论上并未能证明这就是熵条件。

若 $s=1$，即仅有一个方程，则（3-5-17）成为

$$\lambda(u^-)>\mathscr{S}>\lambda(u^+)$$

和（3-5-16）式一致。

对于理想流体方程组

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho e\end{bmatrix}+\frac{\partial}{\partial x}\begin{bmatrix}\rho u\\ \rho u^2+P\\ \rho ue+uP\end{bmatrix}=0 \tag{3-5-18}$$

有三条特征线

$$u-c<u<u+c$$

c 为音速。其中

$$\lambda_1=u-c$$
$$\lambda_2=u$$
$$\lambda_3=u+c$$

按 Lax 的定义，有三种可能情况，间断是激波：

①$k=1$，$u^--c^->\mathscr{S}$，$u^+>\mathscr{S}>u^+-c^+$，为向左激波：见图 3-5-19；

②$k=2$，$u^->\mathscr{S}>u^--c^-$，$c^++c^+>\mathscr{S}>u^+$；

③$k=3$，$u^-+c^->\mathscr{S}>u^-$，$\mathscr{S}>u^++c^+$，为向右激波，见图 3-5-20。

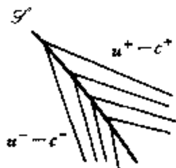


图 3-5-19 向左激波

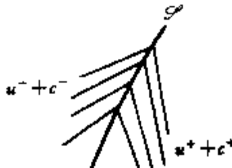


图 3-5-20 向右激波

情况②实际上不存在。若（3-5-7）式允许有等号，即间断可以沿特征线传播，则可以改为

$$u^- = \mathscr{S} > u^- - c,$$
$$u^+ + c > \mathscr{S} = u^+$$

则为接触间断。

由（3-5-9）式及（3-5-18）式中第一式（见图 3-5-21），得下式

$$\mathscr{S} = \frac{\rho^+ u^+ - \rho^- u^-}{\rho^+ - \rho^-}$$

$$D = \frac{\rho_0 u_0 - \rho_1 u_1}{\rho_0 \rho_1}$$

或
$$\rho_0 D = \rho_1 \ (D - u_1)$$

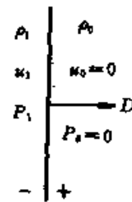


图 3-5-21 激波前后参量

上式就是通常的质量守恒方程。由（3-5-18）式中第二式得

$$\mathscr{S} = \frac{[\rho^+ \ (u^+)^2 + P^+] - [\rho^- \ (u^-)^2 + P^-]}{\rho^+ u^+ - \rho^- u^-}$$

$$D = \frac{P_1 + \rho_1 u_1{}^2}{\rho_1 u_1}$$

或
$$\begin{aligned} P_1 &= D\rho_1 u_1 - \rho_1 u^2 \\ &= u_1 \ (D\rho_1 - \rho_1 D + \rho_0 D) \\ &= \rho_0 D u_1 \end{aligned}$$

上式就是通常的动量守恒方程。

由（3-5-18）中第三式

$$\mathscr{S} = \frac{\rho^+ u^+ e^+ + u^+ P^+ - \rho^- u^- e^- - u^- P^-}{\rho^+ e^+ - \rho^- e^-}$$

$$D = \frac{\rho_1 u_1 e_1 + u_1 P_1}{\rho_1 e_1 - e_0 \rho_0}$$

$$\rho_1 e_1 - \rho_0 e_0 = \frac{\rho_1 u_1 e_1}{D} + \frac{u_1 P_1}{D}$$

$$\rho_1 e_1 - \rho_0 e_0 \doteq (\rho_1 - \rho_0) e_1 + \frac{u_1 P_1}{D}$$

$$e_1 - e_0 = \frac{u_1 P_1}{\rho_0 D}$$

在此 e 包括动能和内能

$$e = \frac{1}{2} u^2 + e_e$$

可见，（3-5-9）式表示了激波前后的三个守恒律。而（3-5-18）本身代表了三个守恒方程，我们将形如

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

的方程组称为守恒型方程组。称下式

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \sum_{a=1}^{d} A^{(a)} \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x_a} = 0$$

为非守恒型方程组。

在求解双曲型方程时，为了使解是唯一的，要求解内的同族特征线不能相交。很多物理

和力学现象的问题有间断解，从数学上讲，就是产生了同族特征线相交。为此要求把解（称为古典解）的概念扩大，使之能包含间断解，称为广义解，这就产生了弱解的概念。但是，弱解不是唯一的，这只有利用具体的物理或力学条件来解决。例如对于Rankine-Hugoniot强间断，保留熵增加的解，去掉熵减少的解，这就是熵条件。

考察一维方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}=0 \tag{3-5-19}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}=\varepsilon\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{3-5-20}$$

式中，$\varepsilon>0$ 是一个小参数。(3-5-19) 式的稳定的差分格式常带有耗散项，实际上就成为 (3-5-20) 的差分方程了。而后者是抛物型方程，这一点是很容易证明的。

当 $\varepsilon\to0$ 时，(3-5-19) 式是 (3-5-20) 式的极限方程。后者的解，当 $\varepsilon\to0$ 时，满足 (3-5-19) 式和 (3-5-20) 式。(3-5-20) 式有唯一的连续解，可见粘性项 $\varepsilon\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 对方程 (3-5-19) 式的解起了平滑作用。也就是说，为了差分方程的稳定性而加进的耗散项，当 $\varepsilon\to0$ 时，就是 (3-5-19) 式的解；当 ε 很小时，以一定精度逼近 (3-5-19) 式的解。

3.5.6 一维方程组的差分格式

一维方程组

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}=0 \tag{3-5-3}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}+A\frac{\partial u}{\partial x}=0 \tag{3-5-2}$$

其中，第一式是守恒型的，第二式是非守恒型的。下面介绍一些关于它们的差分格式。

一、一步法

(1) Lax 格式：

由 (3-5-3) 式，有

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{2}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)-\frac{s}{2}(f_{j+1}^n-f_{j-1}^n) \tag{3-5-21}$$

其中 $$s=\frac{\tau}{h}$$

截断误差为 $$O(\tau+h^2)$$

(2) Lax-Wendroff 格式：

对于 (3-5-3) 式，由泰勒展开

$$u(j,n+1)=u(j,n)+\tau u_t+\frac{\tau^2}{2!}u_{tt}+O(\tau^3)$$

$$u_t=-f_x$$

$$u_{tt}=-(f_x)_t=-(f_t)_x=-(Au_t)_x=(Af_x)_x$$

可得

$$u(j,n+1)=u(j,n)+\tau u_t+\frac{\tau^2}{2}(Af_x)_x+O(\tau^3)$$

$$u_t=\frac{u(j,n+1)-u(j,n)}{\tau}-\frac{\tau}{2}(Af_x)_x+O(\tau^2)$$

$$\frac{\tau}{2}(Af_x)_x=\frac{\tau}{2h}\left(A^n_{j+\frac{1}{2}}\frac{f^n_{j+1}-f^n_j}{h}-A^n_{j-\frac{1}{2}}\frac{f^n_j-f^n_{j-1}}{h}\right)+O(h^2)$$

$$f_x=\frac{1}{2h}(f^n_{j+1}-f^n_{j-1})+O(h^2)$$

(3-5-3)式的差分格式为

$$u^{n+1}_j=u^n_j-\frac{s}{2}(f^n_{j+1}-f^n_{j-1})+\frac{s^2}{2}[A^n_{j+\frac{1}{2}}(f^n_{j+1}-f^n_j)-A^n_{j-\frac{1}{2}}(f^n_j-f^n_{j-1})]\qquad O(\tau^2+h^2)\tag{3-5-22}$$

这就是 Lax-Wendroff 格式，是全二阶精度。

（3）迎风（Up-Wind）格式：

对（3-5-18）式可写为

$$\boldsymbol{U}_t+\boldsymbol{F}_x=0$$

式中

$$\boldsymbol{U}=(\rho,\rho u,\rho e)^T$$

$$\boldsymbol{F}=(\rho u,\rho u^2+P,\rho ue+uP)^T$$

迎风格式为

$$U^{n+1}_j=U^n_j-ms(F^n_j-F^n_{j+m})-\frac{s}{2}(P^n_{j+1}-P^n_{j-1})\qquad O(\tau+h)\tag{3-5-23}$$

式中

$$\boldsymbol{P}=(0,P,0)^T$$

$$m=\begin{cases}-1 & u^n_j>0\\ 1 & u^n_j\leqslant 0\end{cases}$$

其中动量方程为

$$u^{n+1}_j=u^n_j-\mathrm{m}\cdot s[(\rho u^2)^n_j-(\rho u^2)^n_{j+m}]-\frac{s}{2}(P^n_{j+1}-P^n_{j-1})$$

把 P 取出来不做迎风处理，这是为了改善格式的稳定性。

下面对以上格式的稳定性做一些分析。

对 Lax 格式（3-5-21）式，考虑其耗散项

由

$$u^{n+1}_j=u^n_j+\tau u_t+\frac{\tau^2}{2}u_{tt}+\frac{\tau^3}{3!}u_{ttt}+\cdots$$

$$u^n_{j+1}=u^n_j+hu_x+\frac{h^2}{2}u_{xx}+\frac{h^3}{3!}u_{xxx}+\cdots$$

$$u^n_{j-1}=u^n_j-hu_x+\frac{h^2}{2}u_{xx}-\frac{h^3}{3!}u_{xxx}+\cdots$$

$$\frac{u^n_{j+1}+u^n_{j-1}}{2}=u^n_j+\frac{h}{2}u_{xx}+\cdots$$

$$u^n_j=\frac{u^n_{j+1}+u^n_{j-1}}{2}-\frac{h^2}{2}u_{xx}+\cdots$$

$$f^n_{j+1}-f^n_{j-1}=2hf_x+2\frac{h^3}{3!}f_{xxx}+\cdots$$

$$f_x=\frac{f^n_{j+1}-f^n_{j-1}}{2h}-\frac{h^2}{3!}f_{xxx}+\cdots$$

则 $$u_t+f_x=\frac{u_j^{n+1}-\frac{u_{j+1}^n+u_{j-1}^n}{2}}{\tau}+\frac{f_{j+1}^n-f_{j-1}^n}{2h}+\frac{h^2}{2\tau}u_{xx}-\frac{\tau}{2}u_{tt}-\frac{h^2}{3!}f_{xxx}+\cdots$$

耗散项主要看 u_{xx} 项。前面已经得到

$$u_{tt}=(Af_x)_x=(A^2u_x)_x=A^2u_{xx}+(A^2)_xu_x$$

而

$$(A^2)_x=2AA_x=2AA_uu_x$$

不属于 u_{xx} 项，故得 u_{xx} 的系数矩阵为

$$\frac{h^2}{2\tau}E-\frac{\tau}{2}A^2=\frac{h^2}{2\tau}(E-A^2s^2)$$

式中 E 是单位矩阵。耗散项大于零时格式才稳定，故稳定性条件为 $E-A^2s^2$ 为正定矩阵。或

$$s\|A\|\leqslant 1$$

A 的特征值对于（3-5-18）式来说是

$$u+c,\qquad u-c,\qquad u$$

谱半径为

$$|u+c|$$

因为

$$\rho(A)\leqslant\|A\|$$

故 Lax 格式稳定的必要条件为

$$\text{Max}\ s|u+c|\leqslant 1\qquad (x_j,t_n)\in\Omega_j^n \tag{3-5-24}$$

可以证明其余两种格式的稳定必要条件也是（3-5-24）式。

Lax 格式和迎风格式简单而有效，能顺利通过间断面，缺点是光滑效应太强，把流场中一些细微特征给抹去了。在亚音速情况，耗散项稍强，但在强间断情况，则还要加人工粘性。

L--W 格式则由于色散效应，计算中发现会产生比以上两法更强的寄生振荡。

二、二步 — 校正法

(1) Richtmyer 格式（1963 年）：

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{2}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)-\frac{s}{2}(f_{j+1}^n-f_{j-1}^n) \tag{3-5-25}$$

$$u_j^{n+2}=u_j^{n+1}-\frac{s}{2}(f_{j+1}^{n+1}-f_{j-1}^{n+1})$$

第一步用 Lax 格式预估，第二步用简单的 FTCS 格式校正。整个格式的精度为 $O(\tau+h^2)$。

(2) Mac Cormack 方法

这里的 Mac Cormack 方法（简称 M 格式）代表预估-校正法。实际上这种方法更恰当地应称为欧拉-预估校正法。

下面来讨论线化模型的一维偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+c\frac{\partial u}{\partial x}=0\qquad C>0$$

以差分算子 D 代替微分算子 $\frac{\partial}{\partial x}$，则得

$$\frac{\partial u_j}{\partial t}=-cDu_j^n=f(u)$$

由以上公式可以构造$O(\Delta t^2)$精度的预估-校正格式。

预估 $u_j^{(1)}=cDu_j^n\tau+u_j^n$

修正 $u_j^{n+1}=\frac{1}{2}(u_j^{(1)}+u_j^n)-\frac{c}{2}Du_j^{(1)}\tau$

Mac Cormack 的主要思想是在预估-校正中采用互反差分算子，如

$$u_j^{(1)}=-c\Delta_h u_j^n\tau+u_j^n$$

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{2}(u_j^{(1)}+u_j^n)-\frac{c}{2}\nabla_h u_j^{(1)}\tau$$

这样做，使格式具有形式上的二阶精度。当然，也可以在预估和校正步骤中采用中心差分来达到二阶精度的目的，但这样做就失去了格式的耗散优势。实际上，对于$c=$常数来讲，Mac Cormack 方法的合格式即为 Lax-Wendroff 格式，并无特别的优越处。但是在$c\neq$常数（非线性或拟线性情况下），则M格式的优点可以很好的表现出来。因为可以根据c的正负来决定第一步预估中采用迎风格式，这是具有耗散优势的格式，而在第二步中采用逆风格式，耗散性减弱，仅起修正作用。关于这两种格式的耗散性质，前面已经介绍过了。

对于一维守恒型方程组

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x}+\boldsymbol{\varphi}=0$$

其中

$$\boldsymbol{u}=(u_1,u_2,\cdots,u_s)^T$$

$$\boldsymbol{f}=(f_1,f_2,\cdots,f_s)^T$$

$$\boldsymbol{\varphi}=(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_s)^T$$

根据以上对模型方程的研究，格式应写为

$$\boldsymbol{u}_j^{(1)}=\boldsymbol{u}_j^n-\frac{\tau}{h}[\lambda\Delta_h\boldsymbol{f}_j^n+(1-\lambda)\nabla_h\boldsymbol{f}_j^n]$$

$$\boldsymbol{u}_j^{n+1}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{u}_j^{(1)}+\boldsymbol{u}_j^n)-\frac{1}{2}\frac{\tau}{h}[(1-\lambda)\Delta_h\boldsymbol{f}_j^{(1)}+\lambda\nabla_h\boldsymbol{f}_j^{(1)}]$$

同样，对于多维问题

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_1}\boldsymbol{F}_1(\boldsymbol{u})+\frac{\partial}{\partial x_2}\boldsymbol{F}_2(\boldsymbol{u})+\frac{\partial}{\partial x_3}\boldsymbol{F}_3(\boldsymbol{u})+\boldsymbol{F}_4(\boldsymbol{u})=0$$

M格式可以推广

$$\boldsymbol{u}^{(1)}=\boldsymbol{u}^n-\sum_{i=1}^{3}\frac{\tau}{hi}[\lambda_i\nabla_{hi}\boldsymbol{F}_i^n+(1-\lambda_i)\nabla_{hi}\boldsymbol{F}_i^n]$$

$$\boldsymbol{u}^{n+1}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{u}^n+\boldsymbol{u}^{(1)})-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\frac{\tau}{hi}[(1-\lambda_i)\Delta_{hi}\boldsymbol{F}_i^{(1)}+\lambda_i\nabla_{hi}\boldsymbol{F}_i^{(1)}]$$

式中的$\boldsymbol{u}$，$\boldsymbol{F}_1$，$\cdots$，$\boldsymbol{F}_3$均为向量。一般说来，开关数λ_i的选择要在预估步骤中计及迎风特性，即在第一步中用迎风格式，以增加格式的耗散优势，以此来处理间断（例如激波问题）。

应指出的是，在爆炸力学中的爆轰波计算中，M格式的格式粘性太弱了，应加人工粘性。

以上介绍的两方法都是二步法。二步法的优点是在同样精度下，比一步法更省机时，也更具有灵活性。

3.5.7 多维方程组的差分格式

二维理想流体力学守恒型方程组为

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x}+\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial y}=0 \tag{3-5-26}$$

其中

$$\boldsymbol{u}=(\rho,\ \rho u,\ \rho v,\ \rho e)^T$$

$$\boldsymbol{g}=(\rho v,\ \rho uv,\ \rho v^2+P,\ (\rho e+P)\ v)^T$$

$$\boldsymbol{f}=(\rho u,\ \rho u^2+P,\ \rho uv,\ (\rho e+P)\ u)^T$$

取 $m=\rho u$, $n=\rho v$

状态方程为

$$P=(\gamma-1)\left[\rho e-\frac{1}{2}\left(\frac{m^2}{\rho}+\frac{n^2}{\rho}\right)\right] \tag{3-5-27}$$

非守恒型形式

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+A\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x}+B\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial y}=0 \tag{3-5-28}$$

其中

$$A=\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -\frac{3-\gamma}{2}u^2+\frac{1-\gamma}{2}v^2 & (\gamma-3)u & (\gamma-1)v & 1-\gamma \\ uv & -v & -u & 0 \\ \gamma eu+(1-\gamma)u(u^2+v^2) & -\gamma e+\frac{\gamma-1}{2}(3u^2+v^2) & (\gamma-1)uv & -\gamma u \end{bmatrix}$$

$$B=\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ uv & -v & -u & 0 \\ \frac{3-\gamma}{2}v^2+\frac{1-\gamma}{2}u^2 & (\gamma-1)u & (\gamma-3)v & 1-\gamma \\ \gamma ev+(1-\gamma)v(u^2+v^2) & (\gamma-1)uv & -\gamma e+\frac{\gamma-1}{2}(3v^2+u^2) & -\gamma v \end{bmatrix}$$

一、直接差分

现介绍 Lax 格式。由（3-5-26）式

$$\boldsymbol{u}_{i,j}^{n+1}=\frac{1}{4}(\boldsymbol{u}_{i+1,j}+\boldsymbol{u}_{i-1,j}+\boldsymbol{u}_{i,j+1}+\boldsymbol{u}_{i,j-1})^n-\tau\left(\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x}+\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial y}\right)_{i,j}^n$$

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x}+\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial y}\right)_{i,j}^n=\left(\frac{\boldsymbol{f}_{i+1,j}-\boldsymbol{f}_{i-1,j}}{2h}+\frac{\boldsymbol{f}_{i,j+1}-\boldsymbol{f}_{i,j-1}}{2k}\right)^n \tag{3-5-29}$$

或

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x}+\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial y}\right)_{i,j}^n=A_j^n\frac{\boldsymbol{u}_{i+1,j}^n-\boldsymbol{u}_{i-1,j}^n}{2h}+B_j^n\frac{\boldsymbol{u}_{i,j+1}^n-\boldsymbol{u}_{i,j-1}^n}{2k}$$

$$O(\tau+\Delta x^2+\Delta y^2)$$

式中 h 为 x 方向步长，k 为 y 方向步长。

二、“和”分裂格式

前面介绍的是交替用不同的格式来计算，后来人们发展为将控制方程分成几个部分，分

别求差分格式，再叠加起来。以匀流方程为例

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial y}=0$$

用 FTFS 格式

$$\begin{cases} u_{ij}^{n+\frac{1}{2}}=u_{ij}^{n}-\tau\Delta_{h}u_{ij}^{n} \\ u_{ij}^{n+1}=u_{ij}^{n+\frac{1}{2}}-\tau\Delta_{k}u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} u_{ij}^{n+1} &= u_{ij}^{n}-\tau\Delta_{h}u_{ij}^{n}-\tau\Delta_{k}(u_{ij}^{n}-\tau\Delta_{h}u_{ij}^{n}) \\ &= u_{ij}^{n}-\tau\Delta_{h}u_{ij}^{n}-\tau\Delta_{k}u_{ij}^{n}+\tau^{2}\Delta_{k}\Delta_{h}u_{ij}^{n} \end{aligned}$$

右边前三项即为 FTFS 格式，精度为 O（$\tau+\Delta x+\Delta y$），现多了一项 $\tau^{2}\Delta_{k}\Delta_{h}u_{ij}^{n}$，精度未变，而计算简化了。

再如方程（3-5-26）式可以分裂为

$$\frac{\partial\tilde{u}}{\partial t}+\frac{\partial\tilde{f}}{\partial x}=0$$

$$\frac{\partial\tilde{u}}{\partial t}+\frac{\partial\tilde{g}}{\partial y}=0$$

例如用 Mac Cormack 格式

① $\tilde{u}_{ij}=u_{ij}^{n}-\tau\Delta_{h}f_{ij}^{n}$

$$u_{ij}^{n+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\left(u_{ij}^{n}+\tilde{u}_{ij}\right)-\frac{\tau}{2}\nabla_{h}\tilde{f}_{ij} \tag{3-5-31}$$

② $\tilde{\tilde{u}}_{ij}=u_{ij}^{n+\frac{1}{2}}-\tau\nabla_{k}g_{ij}^{n+\frac{1}{2}}$

$$u_{ij}^{n+1}=\frac{1}{2}\left(u_{ij}^{n+\frac{1}{2}}+\tilde{\tilde{u}}_{ij}\right)-\frac{\tau}{2}\Delta_{k}\tilde{\tilde{g}}_{ij}$$

该格式是每算一步，换一次 x，y 方向的顺序，例如（3-5-31）式先对 x，后对 y 差分，可记作

$$u^{n+1}=M_{y}M_{x}u^{n}$$

若 $n+1$ 步采用上式，$n+2$ 步则采用

$$u^{n+2}=M_{x}M_{y}u^{n+1}$$

经过这样处理，可能使计算精度提高。

稳定性条件为

$$\left.\begin{aligned} \max|u+a|\frac{\tau}{h}\leqslant 1 \\ \max|v+a|\frac{\tau}{k}\leqslant 1 \end{aligned}\right. \qquad (x_{i},y_{j},t_{n})\in\Omega_{ij}^{n}$$

三、“积”分裂格式

由 Beam & Warming 在 1976 年提出，后由 Briley 等人在 1980 年进一步综合和推广。由（3-5-26）式

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\partial g}{\partial y}=0$$

可得

$$u_{t}^{n}+f_{x}^{n}+g_{y}^{n}=0$$

$$u_{t}^{n+1}+f_{x}^{n+1}+g_{y}^{n+1}=0$$

相加得

$$u_t^n + u_t^{n+1} + f_x^n + f_x^{n+1} + g_y^n + g_y^{n+1} = 0$$

由积分梯形公式

$$u^{n+1} = u^n + \frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial u^n}{\partial t} + \frac{\partial u^{n+1}}{\partial t}\right) + O(\tau^3)$$

代入上式得

$$u^{n+1} = u^n - \frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial f^n}{\partial x} + \frac{\partial g^n}{\partial y} + \frac{\partial f^{n+1}}{\partial x} + \frac{\partial g^{n+1}}{\partial y}\right) + O(\tau^3) \tag{3-5-32}$$

由

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x} = A\frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\frac{\partial g}{\partial y} = \frac{\partial g}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y} = B\frac{\partial u}{\partial y}$$

得

$$\begin{aligned} f^{n+1} &= f^n + A^n(u^{n+1} - u^n) + O(\tau^2) \\ g^{n+1} &= g^n + B^n(u^{n+1} - u^n) + O(\tau^2) \end{aligned} \tag{3-5-33}$$

因为 f 和 g 都是 u 的线性齐次函数，所以有

$$f^n = A^n u^n \quad , \quad g^n = B^n u^n$$

代入（3-5-33）式得

$$\begin{aligned} f^{n+1} &= A^n u^{n+1} + O(\tau^2) \\ g^{n+1} &= B^n u^{n+1} + O(\tau^2) \end{aligned} \tag{3-5-34}$$

将（3-5-34）式代入（3-5-35）式

$$\left[E + \frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}A^n + \frac{\partial}{\partial y}B^n\right)\right]u^{n+1} = \left[E - \frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}A^n + \frac{\partial}{\partial y}B^n\right)\right]u^n + O(\tau^3) \tag{3-5-35}$$

$$\frac{\tau^3}{4}\frac{\partial}{\partial x}A^n\frac{\partial}{\partial y}B^n\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = \frac{\tau^3}{4}\frac{\partial}{\partial x}A^n\frac{\partial}{\partial y}B^n\frac{\partial u}{\partial t} + O(\tau^4)$$

将左边加到（3-5-35）式内，精度仍为 $O(\tau^3)$，得

$$\left(E+\frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial x}A^n\right)\left(E+\frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial y}B^n\right)u^{n+1}$$

$$=\left(E-\frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial x}A^n\right)\left(E-\frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial y}B^n\right)u^n+O(\tau^3)$$

"积"分裂方程为

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= \left(E - \frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial y}B^n\right)u^n \\ \left(E + \frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial x}A^n\right)\tilde{\tilde{u}} &= \left(E - \frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial x}A^n\right)\tilde{u} \\ \left(E + \frac{\tau}{2}\frac{\partial}{\partial y}B^n\right)u^{n+1} &= \tilde{\tilde{u}} \end{aligned} \tag{3-5-36}$$

这就是 Beam & Warming 格式的原始形式。

对空间偏导数采用中心差分

$$\frac{\partial}{\partial x}A^n u^n = \delta_h(Au)^n + O(h^2)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}B^n u^n = \delta_k (Bu)^n + O(k^2)$$

“积”分裂格式成为

$$\tilde{u}_{ij} = u_{ij}^n - \frac{\tau}{4k}\left[(Bu)_{i,j+1}^n - (Bu)_{i,j-1}^n\right]$$

$$\tilde{\tilde{u}}_{ij} + \frac{\tau}{4h}\left(A_{i+1,j}^n \tilde{\tilde{u}}_{i+1,j} - A_{i-1,j}^n \tilde{u}_{i-1,j}\right)$$

$$= \tilde{u}_{ij} - \frac{\tau}{4h}\left(A_{i+1,j}^n \tilde{u}_{i+1,j} - B_{i-1,j}^n \tilde{u}_{i-1,j}\right)$$

$$u_{ij}^{n+1} + \frac{\tau}{4k}\left(B_{i,j+1}^n u_{i,j+1}^{n+1} - B_{i,j-1}^n u_{i,j-1}^{n+1}\right) = \tilde{\tilde{u}}_{i,j}$$

$$O(\tau^2 + h^2 + k^2)$$

上式第一步是显式，第二步是 x 方向隐式，第三步是 y 方向隐式。人们用这类格式进行了许多极复杂的实际问题的数值计算，效果较好。对于强激波则尚需加人人工粘性处理。

3.5.8 差分方程的守恒性

一般说来，爆炸力学的数学模型都是在三个守定律基础上得出的，因此对于差分格式也想到应该具备守恒性质。对于守恒型偏微分方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

据此得到的相容的差分格式，一般能保证守恒性。但应当说明的是，这是在不考虑差分余项前提下而言的，因此它是近似的、粗糙的守恒，并不等价于源方程的物理守恒。而且守恒性是指整个网格区域上的总体守恒，是宏观的，因此不必去苛求差分格式的更精确的守恒。

若从非守恒型偏微分方程出发，一般说来差分格式的守恒性差一些。但是有很多差分格式的计算很成功。

守恒型格式保证了总能量守恒，由于计算的误差，在局部格子里会出现总能小于动能，导致内能为负的不合理现象。而此时若采用非守恒性格式就无此种顾虑。但是总能量守恒应在一定精度范围之内。

3.5.9 人工粘性法（人工耗散法）

前面在介绍一些差分格式时，曾提到由于差分方程的截断误差而产生的格式粘性（又称为隐式耗散、格式耗散等），可以对某些弱的间断起平滑作用，增强计算的稳定性，使计算可以顺利进行。但是对于强间断（例如很强的冲击波、爆轰波等），仅依靠格式粘性是不够的。对于这些强间断，目前常用的方法有两种，一种是激波装配法，一种是激波捕获法。前者我们在这里不作介绍，下面来介绍激波捕获法。

隐式耗散和下面要讲的人工显式耗散都是属于激波捕获法。但是后者更主要的是针对极强的间断面处理的。这是由 Von Neumann & Richtmyer 于 1950 年提出的，称之为人工粘性 (Artificial Viscocity)。这种概念是建立在有关实际流动，而不是理想流动的物理观念基础上的（因为只有理想流动才会产生数学意义上的冲击波）。从物理观点上看，真实的冲击波是应该有一定厚度的，因为物体总是有一定粘性的。如果在理想流动中人为地加上粘性项，对于

冲击波用一个薄的过渡层来代替间断面，而在这个过渡层中各个量，如压力、速度、密度、温度的变化都很快，但是不再间断而是连续的了。在没有冲击波的地方此项最好不起作用。这样处理，使得解域中不再出现间断，而使得微分方程可以应用到全部计算中。

下面介绍人工粘性的形式及有关的一些内容。

一、拉格朗日形式

前面讨论的微分方程基本上都是欧拉坐标下的。在连续介质动力学中，常用的另一种形式是拉格朗日坐标形式。

以一维情况为例，在欧拉坐标下，方程为

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{F}(u)}{\partial r}=\boldsymbol{Q}$$

其中 $\boldsymbol{u}=(r^{\alpha-1}\rho,\ r^{\alpha-1}\rho u,\ r^{\alpha-1}e)^T$

$\boldsymbol{F}(u)=(r^{\alpha-1}\rho u,\ r^{\alpha-1}(\rho u^2+\rho),\ r^{\alpha-1}(eu+Pu))^T$

$\boldsymbol{Q}=(0,\quad (\alpha-1)Pr^{\alpha-2},\quad 0)^T$

而 α 是几何形式参数

$$\alpha=\begin{cases}1 & \text{一维平面}\\ 2 & \text{一维柱对称}\\ 3 & \text{一维球对称}\end{cases}$$

下面将转化到拉格朗日坐标下。首先写出全微分形式

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}+\rho\dfrac{1}{r^{(\alpha-1)}}\dfrac{\partial}{\partial r}(r^{\alpha-1}u)=0\\ \rho\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}+\dfrac{\partial P}{\partial r}=0\\ \rho\dfrac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t}+P\dfrac{1}{r^{\alpha-1}}\dfrac{\partial}{\partial r}(r^{\alpha-1}u)=0\end{cases}\tag{3-5-38}$$

其中 α 的意义同上，而

$$r=\begin{cases}x & \text{一维平面}\\ (x^2-y^2)^{1/2} & \text{一维柱对称}\\ (x^2+y^2+z^2)^{1/2} & \text{一维球对称}\end{cases}$$

设拉格朗日坐标为 m 或 R

$$m=\int_{R_0}^{R}\rho_0R^{\alpha-1}\mathrm{d}R=\int_{r_0}^{r}\rho r^{\alpha-1}\mathrm{d}r$$

即有

$$\frac{\partial m}{\partial R}=\rho_0R^{\alpha-1}$$

$$\frac{\partial m}{\partial r}=\rho r^{\alpha-1}\tag{3-5-39}$$

由以上两式可得

$$\frac{\partial R}{\partial r}=\frac{\rho}{\rho_0}\left(\frac{r}{R}\right)^{\alpha-1}$$

上式即为质量守恒方程。欧拉坐标转换为拉格朗日坐标时，有以下关系式

$$\frac{d}{dt} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \rightarrow \frac{\partial}{\partial R}\frac{\partial R}{\partial r} \text{或} \frac{\partial}{\partial m}\frac{\partial m}{\partial r}$$

将一维方程转化为拉格朗日形式，就是

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \dfrac{\rho_2}{\rho_0}\dfrac{1}{R^{a-1}}\dfrac{\partial}{\partial R}(r^{a-1}u) = 0 \\ \rho\dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{P}{\rho^2}\left(\dfrac{r}{R}\right)^{a-1}\dfrac{\partial R}{\partial r} = 0 \\ \dfrac{\partial e}{\partial t} - \dfrac{P}{\rho_2}\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \\ u = \dfrac{\partial r}{\partial t} \end{cases} \tag{3-5-40}$$

有时用比容 V 来表示，$V=1/\rho$。则

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

于是能量方程为

$$\frac{\partial e}{\partial t} + P\frac{\partial V}{\partial t} = 0 \tag{3-5-41}$$

二、耗散效应

理想流体是忽略了热传导和粘性，Hugoniot 理论所描述的冲击波是强间断。Becker 证明：若考虑热传导，通过激波时，温度是平滑过渡的。对于弱激波，压力和密度也是平滑过渡的。对于强激波，部分是平滑过渡，部分是间断。若考虑粘性，无论对什么强度的冲击波，各个状态和力学量都是平滑过渡的。考虑热传导、粘性时，过渡层厚与耗散系数成正比。实际气体的粘性太小，无法满足差分方程的要求。例如对于真实气体：$-\frac{4}{3}\mu\frac{\partial u}{\partial R}$，则激波厚度为分子自由程的量级。差分方程中间断区仍通不过，为此需要引入人工粘性。

三、人工粘性

根据上面分析，引入人工粘性之后，应满足：

(1) 差分方程能顺利通过激波区。

(2) 冲击波作为参量快速变化的连续过渡层（几乎间断）而自动显示。各参量的变化及激波速度与正确跳跃十分接近。

(3) 附加项使过渡层宽为几个格子（3～4 个），不随时间和激波强度而变，对流场的其它部分无影响。

计算和分析表明，用人工粘性比用人工热传导有利。通常流体粘性是一次项（线性项），过渡层厚度当极强激波通过时趋于零。对极弱冲击波，趋于$\frac{\partial u}{\partial R}$。若采用二次项$\left(\frac{\partial u}{\partial R}\right)^2$，它等价于：对于弱激波，用小粘性系数，对于强击波，用大粘性系数，这样可以使击波计算宽度随激波强度的变化减小。人工粘性项 q 由下式表示

$$q = \begin{cases} b^2(\Delta R)^2\rho\left(\dfrac{\partial u}{\partial R}\right)^2 & \dfrac{\partial u}{\partial R} < 0 \\ 0 & \dfrac{\partial u}{\partial R} \geqslant 0 \end{cases} \tag{3-5-42}$$

式中 b 为调节系数，ΔR 为计算网格尺寸，q 的量纲与压力 P 相同，于是（3-5-40）式成为

$$\begin{cases}\dfrac{\partial r}{\partial t}=u\\ \dfrac{\partial u}{\partial t}+\dfrac{1}{\rho_0}\left(\dfrac{r}{R}\right)^{\alpha-1}\dfrac{\partial}{\partial R}(P+q)=0\\ \dfrac{\partial e}{\partial t}+(P+q)\dfrac{\partial V}{\partial t}=0\\ V=\dfrac{1}{\rho_0}\left(\dfrac{r}{R}\right)^{\alpha-1}\dfrac{\partial r}{\partial R}=\dfrac{1}{\rho_0}\dfrac{\partial r^\alpha}{\partial R^\alpha}\end{cases}\tag{3-5-43}$$

若取状态方程为

$$e=\frac{PV}{\gamma-1}$$

则以上方程组在 $\alpha=1$，活塞问题（活塞以常速推动下）可得到行波解。由解可知，加 q 后光滑化的激波速度和强度未变。Von Neumann & Richtmyer 认为此结论也适用于其它一维问题。

四、差分格式

下面来对（3-5-43）式进行差分。为了达到形式上的二阶精度，用非一致离散格式，见图 3-5-22。

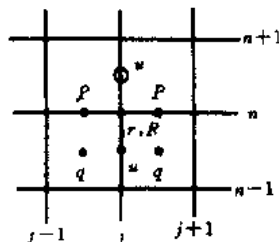


图 3-5-22 Von Neumann & Richtmyen 格式的网格设置

设 n 时刻参量已知，求 $n+1$ 时刻参量。由（3-5-43）式第二式得 $u_j^{n+\frac{1}{2}}$

$$\frac{u_j^{n+1/2}-u_j^{n-1/2}}{\Delta t}+\frac{1}{\rho_0}\left(\frac{r^{\alpha-1}}{R^{\alpha-1}}\right)_j^n\frac{P_{j+\frac{1}{2}}^n-P_{j-\frac{1}{2}}^n+q_{j+1/2}^{n-1/2}-q_{j-1/2}^{n-1/2}}{\Delta R}=0$$

求 r_j^{n+1}，由（3-5-43）式第一式

$$\frac{r_j^{n+1}-r_j^n}{\Delta t}=u_j^{n+1/2}$$

求 $V_{j+1/2}^{n+1}$，由（3-5-43）式第 4 式

$$V_{j+1/2}^{n+1}=\frac{(r_{j+1}^{n+1})^\alpha-(r_j^{n+1})^\alpha}{\rho_0[(R_{j+1})^\alpha-(R_j)^\alpha]}$$

求 $q_{j+1/2}^{n+1/2}$

$$q_{j+1/2}^{n+1/2}=\begin{cases}\dfrac{2b^2}{(V_{j+1/2}+V_{j-1/2})^{n+1}}(u_{j+1}^{n+1/2}-u_j^{n+1/2})^2 & \text{当 } u_{j+1}^{n+1/2}<u_j^{n+1/2} \\ 0 & \text{当 } u_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}\geqslant u_j^{n+\frac{1}{2}}\end{cases}$$

求 $P_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}$，$e_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}$，由（3-5-43）式第 3 式

$$\frac{(e^{n+1}-e^n)_{j+\frac{1}{2}}}{\Delta t}+\left(\frac{P^{n+1}+P^n}{2}+q^{n-\frac{1}{2}}\right)_{j+\frac{1}{2}}\frac{(V^{n+1}-V^n)}{\Delta t}=0$$

$$e_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}=f\left(P_{j+\frac{1}{2}}^{n+1},V_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}\right)$$

除 q 以外，均为中心差分，具有形式上的二阶精度。如果对 q 也用中心差分，则需用迭代求解，另外，q 也不是主要量，所以我们对其不采用中心差分。

五、稳定性分析

要分别对激波区和光滑区来进行分析。

1. 光滑区：是非线性双曲型方程组，以前的方法不能用。因此，我们用近似稳定性分析，即冻结系数法。例如

$$\frac{\partial u}{\partial t}+A\frac{\partial u}{\partial x}=0$$

式中 $A\dfrac{\partial F}{\partial u}$ 为变系数雅可比矩阵，现近似作为常系数矩阵，用 Fourier 稳定性分析方法，求出 Von Neumann 必要条件为

$$\frac{\rho}{\rho_0}a\left(\frac{r}{R}\right)^{\alpha-1}\frac{\Delta t}{\Delta R}\leqslant 1$$

式中 a 为音速。

2. 激波区

仅考虑包含有人为粘性项的有关方程就行了。由能量方程（3-5-43）式第 3 式和状态方程消去 e，得到偏微分方程，其差分格式为

$$\frac{(P^{n+1}V^{n+1}-P^nV^n)_{j+\frac{1}{2}}}{\gamma-1}+\left(\frac{P^{n+1}+P^n}{2}+q^{n+1/2}\right)_{j+\frac{1}{2}}(V^{n+1}-V^n)=0$$

对上式作泰勒展开，消去带时间偏导数项，得到带余项的修改的偏微分方程（MPDE），求得耗散项为

$$-2\frac{(b\Delta R)^2}{\rho_0}\left(\frac{r}{R}\right)^{\alpha-1}\frac{\partial u}{\partial R}\frac{\partial^2 u}{\partial R^2}$$

因为

$$\frac{\partial u}{\partial R}<0$$

得耗散系数 σ_N 为

$$\sigma_N=2\frac{(b\Delta R)^2}{\rho_0}\left(\frac{r}{R}\right)^{\alpha-1}\left|\frac{\partial u}{\partial R}\right|$$

注意，加上 q 之后，方程由双曲型变为抛物型的方程。抛物型方程的显式格式的稳定性条件为

$$0<\frac{\sigma_N\Delta t}{\Delta R^2}\leqslant\frac{1}{2}$$

所以稳定性条件为

$$4b^2 \frac{1}{\rho_0}\left(\frac{r}{R}\right)^{\alpha-1}\left|\frac{\partial u}{\partial R}\right|\Delta t \leqslant 1 \qquad (3\text{-}5\text{-}44)$$

六、人工粘性的其它形式

（1）Von Neumann 粘性也可以写成

$$q=\begin{cases}-\dfrac{(\rho_0 b\Delta R)^2}{V}\dfrac{\partial V}{\partial t}\left|\dfrac{\partial V}{\partial t}\right| & \dfrac{\partial V}{\partial t}<0\\ 0 & \dfrac{\partial V}{\partial t}\geqslant 0\end{cases}$$

（2）Brode（1954）将（3-5-42）式写成一个式子

$$q_B=-\frac{l^2}{V}\left|\frac{\partial u}{\partial R}\right|\left[\frac{\partial u}{\partial R}-\left|\frac{\partial u}{\partial R}\right|\right] \qquad (3\text{-}63)$$

（3）Ludford（1953）提出线性粘性项，适于弱激波

$$q_L=\begin{cases}-\dfrac{b\Delta R}{V}\dfrac{\partial u}{\partial R} & \dfrac{\partial u}{\partial R}<0\\ 0 & \dfrac{\partial u}{\partial R}\geqslant 0\end{cases} \qquad (3\text{-}5\text{-}45)$$

（4）Land shoff（1955）提出线性和二次项叠加。对于二维计算，不同程序有不同形式。例如用散度表示粘性

$$q=\begin{cases}l^2\rho(\mathrm{div}u)^2 & \mathrm{div}u<0\\ 0 & \mathrm{div}u>0\end{cases} \qquad (3\text{-}5\text{-}46)$$

此外，还有张量粘性等。

七、全耗散化方法

前面讲的是在压力项加 q，它只影响动量方程和能量方程，对质量守恒方程未加，可称为局部人工耗散化方法。全耗散化方法有多种形式，例如 Русанов（1961）方法，对于守恒型方程（3-5-3）式

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial F(u)}{\partial x}=0$$

加人工耗散项

$$q(u)=\frac{1}{2}\omega\Delta x\sigma\frac{\partial u}{\partial x}$$

这里 ω 是选择因子，σ 是雅可比矩阵 A 的最大特征值。取

$$F^*(u)=F(u)+q(u)$$

则

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial F^*(u)}{\partial x}=0$$

因为此时加了很强的耗散项，故可以用简单的差分格式。作 FTCS

$$u_j^{n+1}=u_j^n-\frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x}(F_{j+1}^n-F_{j-1}^n)+\frac{1}{2}\omega\Delta t$$
$$\times\left[\sigma_{j+\frac{1}{2}}(u_{j+1}-u_j)-\sigma_{j-\frac{1}{2}}(u_j-u_{j-1})\right]^n+O(\Delta t+\Delta x^2) \qquad (3\text{-}5\text{-}47)$$

这里

$$\sigma^n_{j\pm\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\sigma_j + \sigma_{j\pm1})^n$$

稳定条件为

$$C_{1P} = \max(|u| + a)\frac{\Delta t}{\Delta x}$$
$$C_{1O} \leqslant \omega \leqslant \frac{1}{C_{1P}} \qquad (3\text{-}5\text{-}48)$$

二维问题也可以用 Русановъ 格式，处理激波问题简单而有效，国内有人用该格式进行过强爆炸和激波管计算，结果良好。

参 考 资 料

[1] 计算数学讲义（四），偏微分方程数值解法．京大学，1979.

[2] 李德元，徐国荣，水鸿寿，何高玉，陈光南，袁国兴：二维非定常流体力学数值方法．科学出版社，1987.

[3] 忻孝康，刘儒勋，蒋伯诚：计算流体动力学．国防科技大学出版社，1989.

[4] 陆金甫，关治：偏微分方程数值解法．清华大学出版社，1987.

第四章 典型有限差分方法

现有的有限差分程序种类繁多，按坐标系可分为欧拉型、拉氏(拉格朗日)型和拉氏——欧拉混合型. 欧拉型程序适于计算物质大变形，但是不能清晰显示材料界面，需要用拉氏方法弥补. 拉氏型程序适于计算物质的细微动态行为，能够清晰显示材料界面，但是不适于大变形，需要用欧拉方法弥补. 拉氏——欧拉混合法兼有两者之长. 一般说来，欧拉程序适于爆炸场的宏观计算，拉氏程序适于爆炸作用下结构或局部的细微响应计算. 对于一些课题常常是先用拉氏程序计算，待到变形太大，难以进行时，改用欧拉程序计算，而拉氏——欧拉混合法则企图将两者统一起来. 有的学者认为有较好的发展前景.

本章共介绍九个程序，其中欧拉型程序 6 个，各有其特点. MAC 方法适于不可压缩流体计算；GILA 方法含有隐式格式，适于低速流动计算. 按输运方式分，PIC 方法为离散输运，FLIC、MHEP 和 HELP 方法为连续输运，GILA 方法则兼有两种输运. 在显示材料内界面方面，MHEP 方法用混合网格和不同材料的示踪点显示，PIC 方法用不同材料的质点显示，HELP 则用示踪点联成的示踪线显示，有复杂的逻辑关系，可以细微显示内界面. 拉氏程序介绍二个，HEMP 方法是公认的典型拉氏程序，该节中介绍了滑动边界和网格重分，2DL 程序中介绍了带化学反应效应的数值模拟. 拉氏—欧拉混合型程序方面介绍了 ALE 程序. 本章最后一节介绍了爆炸力学中的一个热门课题——动态断裂的数值模拟.

§4.1 标志网格法(Maker and Cell)

标志网格——MAC 方法由 Harlow 和 Welch 等在 1965 年提出. 这种方法主要是用来解二维不可压流体力学问题，其特点有：

①采用欧拉网格，适于大变形问题的计算；

②格子内用零速度散度条件；

③用无质量拉氏示踪点显示界面和流场运动历史，这也正是这种欧拉型方法能处理材料内界面的关键所在.

1970 年这种方法经 Amsden 和 Harlow 改进，于是便称为 SMAC 方法[1].

4.1.1 控制方程

对于二维平面不可压缩粘性流动方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}u\\v\end{bmatrix}+\frac{\partial}{\partial x}\begin{bmatrix}u^2\\uv\end{bmatrix}+\frac{\partial}{\partial y}\begin{bmatrix}uv\\v^2\end{bmatrix}=-\begin{bmatrix}\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}\\\dfrac{\partial\varphi}{\partial y}\end{bmatrix}+\frac{\partial}{\partial x}\begin{bmatrix}\sigma_{xx}\\\sigma_{yx}\end{bmatrix}+\frac{\partial}{\partial y}\begin{bmatrix}\sigma_{xy}\\\sigma_{yy}\end{bmatrix} \tag{4-1-1}$$

式中 $\varphi=P/\rho$，σ 为粘性应力张量：

$$\left.\begin{aligned}&\sigma_{xx}=2\nu\frac{\partial u}{\partial x} &&\sigma_{yy}=2\nu\frac{\partial v}{\partial y}\\&\sigma_{xy}=\sigma_{yx}=\nu\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right) &&\nu=\mu/\rho\end{aligned}\right\} \tag{4-1-2}$$

式中 μ 是粘性系数，u 和 v 为速度分量，P 为压力，ρ 为密度.

4.1.2 格子及变量配置

用等步长 $\Delta x, \Delta y$，定义点用非一致离散：$u_{i\pm\frac{1}{2},j}$、$v_{i,j\pm\frac{1}{2}}$，$\sigma_{xyi\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}}$，$(\varphi,\sigma_{xx},\sigma_{yy})_{i,j}$，如图(4-1-1)所示.

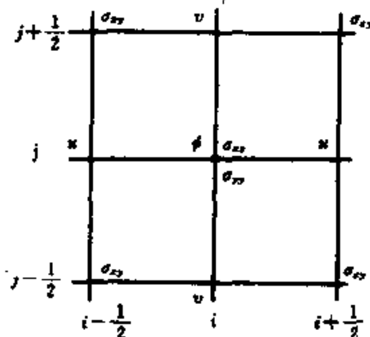


图 4-1-1 MAC 法变量配置

4.1.3 求预估值 $\tilde{u}$、$\tilde{v}$

采用 FTCS 差分格式，并设 n 层参量已知，由(4-1-1)式得

$$\frac{(\tilde{u}-u^n)_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta t}=\delta_x(-u^2-\varphi+\sigma_{xx})^n_{i+\frac{1}{2},j}+\delta_y(-uv+\sigma_{xy})^n_{i+\frac{1}{2},j} \tag{4-1-3}$$

$$\frac{(\tilde{v}-v^n)_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta t}=\delta_y(-v^2-\varphi+\sigma_{yy})^n_{i,j+\frac{1}{2}}+\delta_x(-uv+\sigma_{xy})^n_{i,j+\frac{1}{2}} \tag{4-1-4}$$

式中 n 时刻量若不符合定义点的，可用算术平均值代替，如 $(\sigma_{xx})_{i+\frac{1}{2},j}=\frac{1}{2}[(\sigma_{xx})_{i,j}+(\sigma_{xx})_{i+1,j}]$. 为了克服不稳定性，对 u^2 和 v^2 作如下处理

$$u^2_{i,j}=u_{i+\frac{1}{2},j}u_{i-\frac{1}{2},j}$$
$$v^2_{ij}=v_{i,j+\frac{1}{2}}v_{i,j-\frac{1}{2}} \tag{4-1-5}$$

4.1.4 零速度散度校正

上面得到的 $\tilde{u}$ 和 $\tilde{v}$ 值一般不满足下述不可压缩条件

$$D=\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}=0 \tag{4-1-6}$$

为此要迭代求解，取 $u^h_{i\pm\frac{1}{2},j}$ 和 $v^h_{i,j+\frac{1}{2}}$ 为第 h 次迭代值，计算散度

$$D^h_{i,j}=\delta_x u^h_{i,j}+\delta_y v^h_{i,j} \tag{4-1-7}$$

由运动方程

$$\frac{\partial P}{\partial x}+\rho\frac{\partial u}{\partial t}=0$$
$$\frac{\partial P}{\partial y}+\rho\frac{\partial v}{\partial t}=0 \tag{4-1-8}$$

可得

$$\frac{\Delta\varphi}{\Delta x}=-\frac{\Delta u}{\Delta t}$$
$$\frac{\Delta\varphi}{\Delta y}=-\frac{\Delta v}{\Delta t} \tag{4-1-9}$$

则 $D=\frac{\Delta u}{\Delta x}+\frac{\Delta v}{\Delta y}=-\frac{\Delta\varphi}{\Delta x}\frac{\Delta t}{\Delta x}-\frac{\Delta\varphi}{\Delta y}\frac{\Delta t}{\Delta y}$

由上式得校正量 $\Delta\varphi_{i,j}^{h}$

$$\Delta\varphi_{i,j}^{h} = -\frac{\omega D_{i,j}^{h}[(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]}{\Delta t} \tag{4-1-10}$$

式中 ω 为调节系数取 1～2. 校正值由下式给出

$$\begin{aligned} \varphi_{i,j}^{h+1} &= (\varphi + \Delta\varphi)_{i,j}^{h} \\ u_{i+\frac{1}{2},j}^{h+1} &= u_{i+\frac{1}{2},j}^{h} + \frac{\Delta t}{\Delta x}(\Delta\varphi)_{i,j}^{h} \\ v_{i,j+\frac{1}{2}}^{h+1} &= v_{i,j+\frac{1}{2}}^{h} + \frac{\Delta t}{\Delta y}(\Delta\varphi)_{i,j}^{h} \end{aligned} \tag{4-1-11}$$

再检查不可压缩条件

$$D_{i,j}^{h+1} = \delta_x u_{ij}^{h+1} + \delta_y v_{i,j}^{h+1} \tag{4-1-12}$$

若

$$\left(\frac{|D^{h+1}| - |D^{h}|}{|D^{h+1}| + |D^{h}|}\right)_{i,j} < \varepsilon \tag{4-1-13}$$

则迭代终止，式中 ε 为允许误差. 最后，$n+1$ 时刻校正值由下式给出

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^{h+1} \\ v^{n+1} &= v^{h+1} \\ \varphi^{n+1} &= \varphi^{h+1} \end{aligned} \tag{4-1-14}$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{xx})_{i,j}^{n+1} &= (\sigma_{xx})_{i,j}^{n} + \frac{\nu\Delta t}{(\Delta x)^2}(\varphi_{i+1,j}^{h} - \varphi_{i,j}^{h}) \\ (\sigma_{yy})_{i,j}^{n+1} &= (\sigma_{yy})_{i,j}^{n} + \frac{\nu\Delta t}{(\Delta y)^2}(\Delta\varphi_{i,j+1}^{h} - \Delta\varphi_{i,j}^{h}) \\ (\sigma_{xy})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= (\sigma_{xy})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n} + \frac{\nu\Delta t}{\Delta x\Delta y}(\Delta\varphi_{i+1,j} + \Delta\varphi_{i,j+1} - 2\Delta\varphi_{i,j})^{h} \end{aligned} \tag{4-1-15}$$

4.1.5 示踪点计算

网格分为三种，一是空格 E，二是流体格 F，三是与空格相邻的流体格 S. 在初始时刻在有物质的网格内设置无质量的示踪点(Marker) $M_\mu(x_\mu^n, y_\mu^n)$，$1 \leqslant \mu \leqslant N$，共有 N 个示踪点，它们不参与守恒运算，随着流场运动，可以显示和跟踪流场的运动历史，使得计算具有拉格朗日功能，对于理解力学过程是很有用的.

M_μ 的速度为 u_μ^n 和 v_μ^n，M_μ 在 $n+1$ 时刻的坐标系为

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}_\mu^{n+1} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}_\mu^{n} + \Delta t \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_\mu^{n} \tag{4-1-16}$$

若用改进的欧拉法，则为

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}_\mu^{n+1} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}_\mu^{n} + \frac{\Delta t}{2}\begin{bmatrix} u^n + u^{n+1} \\ v^n + v^{n+1} \end{bmatrix}_\mu \tag{4-1-17}$$

u_μ^{n+1} 和 v_μ^{n+1} 由 M_μ 的最靠近的四个速度分量加权平均得到，即

$$\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_{\mu}^{n+1} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \sum_{h=1}^{4} \begin{bmatrix} A_h u_h \\ B_h v_h \end{bmatrix}_{\mu}^{n+1} = \sum_{h=1}^{4} \begin{bmatrix} a_h u_h \\ b_h u_h \end{bmatrix}_{\mu}^{n+1} \tag{4-1-18}$$

式中 A_h 和 B_h 为加权面积，按如下方法求得.

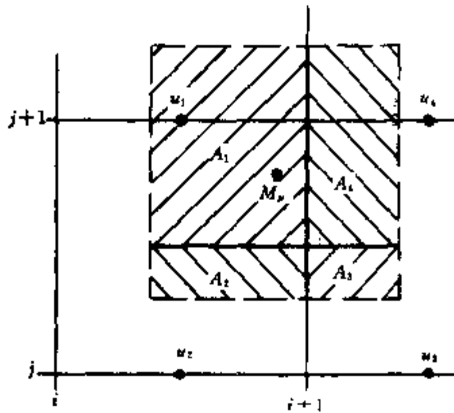


图 4-1-2 u_h 和 A_h

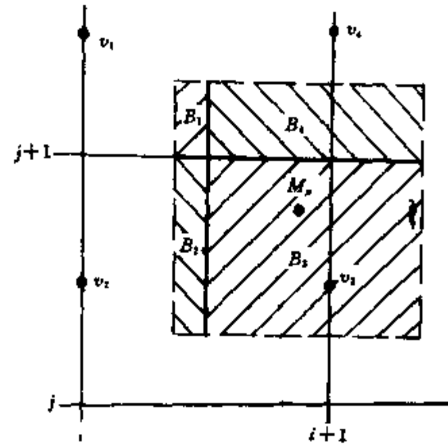


图 4-1-3 v_h 和 B_h

如图 4-1-2 和 4-1-3 所示，根据示踪点 M_μ 的位置，找出最靠近的速度分量 u_1-u_4 和 v_1-v_4，以示踪点为中心作与网格同样大小的四边形 $\Delta x\Delta y$，被以 u_1-u_4 中心点的网格线分割成四块面积 A_1-A_4，被以 v_1-v_4 中心点的网格线分割成四块面积 B_1-B_4，显然有

$$\sum_{h=1}^{4} A_h = \sum_{h=1}^{4} B_h = \Delta x \Delta y \tag{4-1-19}$$

$x_\mu^n/\Delta x$ 和 $y_\mu^n/\Delta y$ 的整数部分为 i 和 j，小数部分为 x_Δ 和 y_Δ，即

$$\begin{aligned} x_\Delta &= \frac{x_\mu^n}{\Delta x} - i \\ y_\Delta &= \frac{y_\mu^n}{\Delta y} - j \end{aligned} \tag{4-1-20}$$

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{i+\frac{1}{2},j+1} \\ u_{i+\frac{1}{2},j} \\ u_{i+\frac{3}{2},j} \\ u_{i+\frac{3}{2},j+1} \end{bmatrix}, \text{当 } x_\Delta \geqslant \frac{1}{2}, \quad \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{i-\frac{1}{2},j+1} \\ u_{i-\frac{1}{2},j} \\ u_{i+\frac{1}{2},j} \\ u_{i+\frac{1}{2},j+1} \end{bmatrix}, \text{当 } x_\Delta < \frac{1}{2} \tag{4-1-21}$$

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{i,j+\frac{3}{2}} \\ v_{i,j+\frac{1}{2}} \\ v_{i+1,j+1/2} \\ v_{i+1,j+\frac{3}{2}} \end{bmatrix}, \text{当 } y_\Delta \geqslant \frac{1}{2}, \quad \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{i,j+\frac{1}{2}} \\ v_{i,j-\frac{1}{2}} \\ v_{i,j+\frac{1}{2}} \\ v_{i+1,j-\frac{1}{2}} \end{bmatrix}, \text{当 } y_\Delta < \frac{1}{2} \tag{4-1-22}$$

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1.5 - x_\Delta)y_\Delta \\ (1.5 - x_\Delta)(1 - y_\Delta) \\ (x_\Delta - 0.5)(1 - y_\Delta) \\ (x_\Delta - 0.5)y_\Delta \end{bmatrix}, \text{当 } x_\Delta \geqslant \frac{1}{2}, \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (0.5 - x_\Delta)y_\Delta \\ (0.5 - x_\Delta)(1 - y_\Delta) \\ (0.5 + x_\Delta)(1 - y_\Delta) \\ (0.5 + x_\Delta)y_\Delta \end{bmatrix}, \text{当 } x_\Delta < \frac{1}{2} \tag{4-1-23}$$

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - x_\Delta)(y_\Delta - 0.5) \\ (1 - x_\Delta)(1.5 - y_\Delta) \\ x_\Delta(1.5 - y_\Delta) \\ x_\Delta(y_\Delta - 0.5) \end{bmatrix}, \text{当 } y_\Delta \geqslant \frac{1}{2}, \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - x_\Delta)(0.5 + y_\Delta) \\ (1 - x_\Delta)(0.5 - y_\Delta) \\ x_\Delta(0.5 - y_\Delta) \\ x_\Delta(0.5 + y_\Delta) \end{bmatrix}, \text{当 } y_\Delta < \frac{1}{2} \tag{4-1-24}$$

当 u_μ^{n+1} 和 v_μ^{n+1} 确定之后，就可以根据(4-1-17)式求得 x_μ^{n+1} 和 y_μ^{n+1}.

4.1.6 自由面约定

如图 4-1-14 所示，边界格 S 分别与 1 个、2 个和 3 个空格 E 相邻，相应约定条件为

$$\begin{aligned} &a.\ v_n = v_s \\ &b.\ v_n = v_s, u_w = u_e \\ &c.\ v_n = v_s, u_w^{n+1} = u_w^n,\ u_e^{n+1} = u_e^n, \end{aligned} \tag{4-1-25}$$

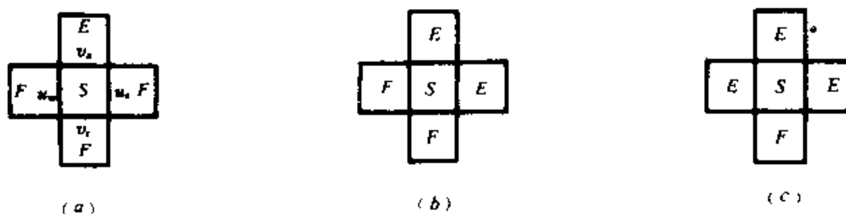


图 4-1-4 自由面约定

4.1.7 标志网格法的应用

MAC 方法在不可压缩流体运动领域得到了广泛的应用，计算了许多有自由面的流动问题，如一滴水滴入浅水池中溅起水花，打开水闸后涌波进入静止水塘等. MAC 进一步改进和发展，能够计算多种材料问题，提高计算精度，发展到三维计算，用于计算 Taylor 不稳定性、曲线固壁和可动固壁问题等.

§4.2 质点网格法(Particle in Cell)

质点网格法或称 PIC 方法，首先由 Evan 和 F. H. Harlow 在 1955 年提出，A. A. Amsden.[2](1966)做了详细总结. 该方法把连续介质(可看作无穷质点系)凝聚成有限的质点系，质点有质量，参与守恒运算，通过对质点的运算和追踪来实现流场数值模拟和界面显示. 主要特

点是：

① 采用欧拉网格；

② 拉氏质点是带质量的，可以采用不同的物质符号，以计算多种物质同时存在的系统. 图 4-2-1 的为两种物质的情况.

③ 流体状态 u, v, p, ρ, e 完全由质点及分布来决定；

④ 计算分两步进行：

第一步：拉氏计算，计算压力梯度效应；

第二步：欧拉计算，计算网格间输运效应.

PIC 方法对计算机的速度和存贮量都提出了较高的要求，因为它不但要计算和存贮各网格上的诸力学量，而且要计算和存贮大量与质点有关的参量.

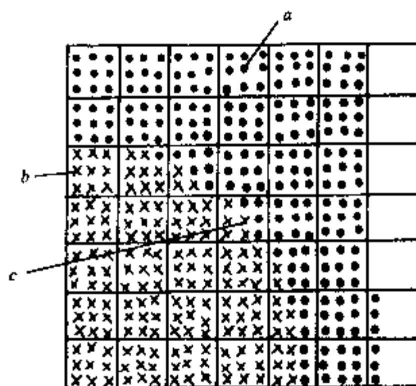


图 4-2-1 流场中质点配置

a. • 物质纯格；b. × 物质纯格；c. • 和 × 物质混合格

4.2.1 控制方程组

采用二维轴对称的无粘、无热传导的可压缩流动方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\rho u + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r\rho u = 0 \qquad (4\text{-}2\text{-}1)$$

$$\rho\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} + \rho u\frac{\partial}{\partial r}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} + \rho v\frac{\partial}{\partial z}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r}(P+q) \\ \dfrac{\partial}{\partial z}(P+q) \end{bmatrix} \qquad \begin{matrix}(4\text{-}2\text{-}2) \\ (4\text{-}2\text{-}3)\end{matrix}$$

$$\rho\frac{\partial}{\partial t}\left[e + \frac{1}{2}(u^2+v^2)\right] + \rho u\frac{\partial}{\partial r}\left[e + \frac{1}{2}(u^2+v^2)\right] + \rho v\frac{\partial}{\partial z}\left[e + \frac{1}{2}(u^2+v^2)\right]$$

$$= -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}[(P+q)ur] - \frac{\partial}{\partial z}[(P+q)v] \qquad (4\text{-}2\text{-}4)$$

边界条件是：

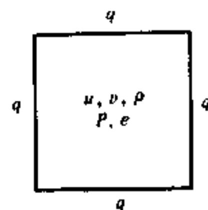
左、右连续边界： $\dfrac{\partial u}{\partial r} = \dfrac{\partial P}{\partial r} = \dfrac{\partial \rho}{\partial r} = \dfrac{\partial e}{\partial r} = 0$ (4-2-5)

上、下连续边界： $\dfrac{\partial v}{\partial z} = \dfrac{\partial P}{\partial z} = \dfrac{\partial \rho}{\partial z} = \dfrac{\partial e}{\partial z} = 0$ (4-2-6)

左、右固壁： $u = 0,\ \dfrac{\partial P}{\partial r} = 0$ (4-2-7)

上、下固壁： $v = 0,\ \dfrac{\partial P}{\partial z} = 0$ (4-2-8)

自由界面： $P = 0$ (4-2-9)



4.2.2 网格与变量配置

如图 4-2-2 所示，解域为 $o \leqslant r \leqslant R, 0 \leqslant z \leqslant Z$，取等步长 $\Delta r, \Delta z$，所以

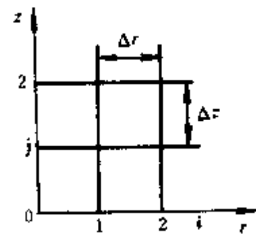


图 4-2-2 PIC 的变量配置

$$\begin{cases} 0 \leqslant i \leqslant I & I = \dfrac{R}{\Delta r} \\ 0 \leqslant j \leqslant J & J = Z/\Delta Z \end{cases}$$

格子的标号取左下角标号，图 4-2-2 中格子 A 就为(1,1)，其格心坐标为

$$(r_i, Z_j) = \left[\left(i + \frac{1}{2}\right)\Delta r, \left(j + \frac{1}{2}\right)\Delta Z\right] \tag{4-2-10}$$

参量 u, v, ρ, P, e 均定义在格心，q 定义在格边.

格子体积 τ_{ij} 是截面为 $\Delta r \Delta Z$ 的环形体积

$$\tau_{ij} = 2\pi r_{ij} \Delta r \Delta Z \tag{4-2-11}$$

格子质量

$$M_{ij} = \tau_{ij} \rho_{ij} \tag{4-2-12}$$

质点放置在网格内，第 k 个质点 P_k 的坐标为 (r_k, Z_k)，$r_k/\Delta r, Z_k/\Delta Z$ 的整数部分为 i，j，质点的质量为 m_k，设 $t=0$ 时，(i,j) 格内放了 s 个(s 一般是平方数，如 9,16 等)质点，那么

$$m_k = \tau_{ij} \rho_{ij}^0 / s \tag{4-2-13}$$

4.2.3 压力效应计算

这一步采用"和"分裂格式，就是在控制方程中去掉输运项，然后进行差分. 由(4-2-2)、(4-2-3)和(4-2-4)式有

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r}(P + q) \tag{4-2-14}$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial Z}(P + q) \tag{4-2-15}$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \frac{P}{r} \frac{\partial}{\partial r} ur - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} qur + u \frac{\partial q}{\partial r} - P \frac{\partial v}{\partial Z} - \frac{\partial}{\partial z} qv + v \frac{\partial q}{\partial Z} \tag{4-2-16}$$

首先计算试探值(tentative values)，对时间采用向前差分，对空间采用中心差分，由(4-2-14)、(4-1-15)式得

$$\tilde{u}_{ij} = u_{ij}^n + \frac{\Delta t}{\rho_{ij} \Delta r}\left[(P + q)_{i-\frac{1}{2},j}^n - (P + q)_{i+\frac{1}{2},j}^n\right] \tag{4-2-17}$$

$$\tilde{v}_{ij} = v_{ij}^n + \frac{\Delta t}{\rho_{ij}^n \Delta Z}\left[(P + q)_{i,j-\frac{1}{2}}^n - (P + q)_{i,j+\frac{1}{2}}^n\right] \tag{4-2-18}$$

格边量取格心量的算术平均值，例如 $P_{i-\frac{1}{2},j} = \dfrac{1}{2}(P_{i-1,j} + P_{ij})$，若邻格是真空，则格边 $P=0$，若邻格是刚壁(或对称轴)则 P 取格心值. 人工粘性的计算由下式确定

$$\begin{bmatrix} q_{i+\frac{1}{2},j} \\ q_{i-\frac{1}{2},j} \\ q_{i,j+\frac{1}{2}} \\ q_{i,j-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} = au_0 M_{ij} \begin{bmatrix} M_{i+1,j}(u_{ij} - u_{i+1,j})/[(M_{ij} + M_{i+1,j})(\tau_i + \tau_{i+1})] \\ M_{i-1,j}(u_{i-1,j} - u_{ij})/[(M_{ij} + M_{i-1,j})(\tau_i + \tau_{i-1})] \\ M_{i,j+1}(v_{ij} - v_{i,j+1})/[(M_{ij} + M_{i,j+1})(2\tau_i)] \\ M_{i,j-1}(v_{i,j-1} - v_{ij})/[(M_{ij} + M_{i,j-1})(2\tau_i)] \end{bmatrix} \tag{4-2-19}$$

式中 au_0 为系数，并且当 Δu 或 $\Delta v \leqslant$ 时，取 $q=0$，当邻格是刚壁或轴线时，取 $q=0$. 在求出 $\tilde{u}$、$\tilde{v}$

之后，要进行检验，看它们是否超过稳定性规定，然后计算 $\tilde{e}$. 由(4-2-16)式得

$$\frac{\rho^n_{ij}(\tilde{e}-e^n)_{ij}}{\Delta t} = -\frac{P^n_{ij}}{r_{ij}}\delta_r(\bar{u}r)_{ij} - \frac{1}{r_i}\delta_r(q^n\bar{u}r)_{ij} + \bar{u}_{ij}\delta_r q^n_{ij} - P^n_{ij}\delta_z\bar{v}_{ij} - \delta_Z(q^n\bar{v})_{ij} + \bar{v}_{ij}\delta_Z q^n_{ij} \tag{4-2-20}$$

式中 δ_r,δ_Z 表示中心差分符号，且

$$\left.\begin{aligned}
(\bar{u}r)_{i-\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{4}[r_{i-1}(\tilde{u}+u^n)_{i-1,j} + r_i(\tilde{u}+u^n)_{ij}] \\
(\bar{u}r)_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{4}[r_{i+1}(\tilde{u}+u^n)_{i+1,j} + r_i(\tilde{u}+u^n)_{ij}] \\
\bar{v}_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{4}[(\tilde{v}+v^n)_{i,j+1} + (\tilde{v}+v^n)_{ij}] \\
\bar{v}_{i,j-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{4}[(\tilde{v}+v^n)_{i,j-1} + (\tilde{v}+v^n)_{ij}]
\end{aligned}\right\} \tag{4-2-21}$$

这是因为定义了

$$\left.\begin{aligned}
\bar{u} &\equiv \frac{1}{2}(\tilde{u}+u^n) \\
\bar{v} &\equiv \frac{1}{2}(\tilde{v}+v^n)
\end{aligned}\right\} \tag{4-2-22}$$

若邻格是空格，则

$$\left.\begin{aligned}
\bar{u}r &= \frac{1}{2}r_i(\tilde{u}+u^n)_{ij} \\
\bar{v} &= \frac{1}{2}(\tilde{v}+v^n)_{ij}
\end{aligned}\right\} \tag{4-2-23}$$

若邻格是刚壁或轴线，则 $\bar{u}r=0$. 计算表明，(4-2-20)式的稳定性较好. 比内能计算以后，求格子总能量 ET：

$$\widetilde{ET}_{ij} = M^n_{ij}\left[\tilde{e} + \frac{1}{2}(\tilde{u}^2+\tilde{v}^2)\right]_{ij} \tag{4-2-24}$$

比能 E 为：

$$\tilde{E}_{ij} = \widetilde{ET}/M^n_{ij} \tag{4-2-25}$$

4.2.4 质点坐标的确定

p_k 在 n 时刻的坐标为(r_k,Z_k)，现将格子过中心分成如图 4-2-3 所示 1,2,3,4 四个区，若质点 p_k 在：

1 区：则 $r_k \geqslant (i+\frac{1}{2})\Delta r$，$Z_k \geqslant (j+\frac{1}{2})\Delta Z$；

2 区：则 $r_k < (i+\frac{1}{2})\Delta r$，$Z_k \geqslant (j+\frac{1}{2})\Delta Z$；

3 区：则 $r_k < (i+\frac{1}{2})\Delta r$，$Z_k < (j+\frac{1}{2})\Delta Z$；

4 区：则 $r_k \geqslant (i+\frac{1}{2})\Delta r$，$Z_k < (j+\frac{1}{2})\Delta Z$.

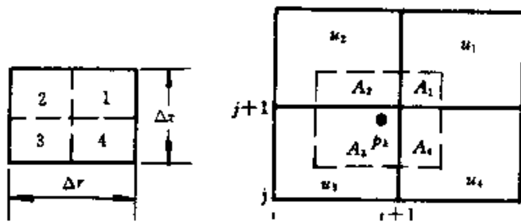


图 4-2-3 四等分网格

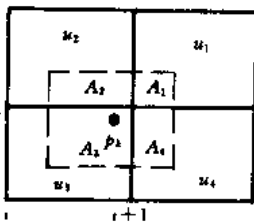


图 4-2-4 加权面积

质点 p_k 的有效速度(effective velocity)u^{n+1}_{eff}

和 v_{eff}^{n+1} 由邻近四个网格的速度按面积加权得到，加权面积如图 4-2-4 所示，若 p_k 位于 1 区，则

$$\left.\begin{aligned} A_1 &= \left[Z_k - \left(j+\frac{1}{2}\right)\Delta Z\right]\left[r_k - \left(i+\frac{1}{2}\right)\Delta r\right] \\ A_2 &= \left[Z_k - \left(j+\frac{1}{2}\right)\Delta Z\right]\left[\left(i+\frac{3}{2}\right)\Delta r - r_k\right] \\ A_3 &= \left[\left(j+\frac{3}{2}\right)\Delta Z - Z_k\right]\left[\left(i+\frac{3}{2}\right)\Delta r - r_k\right] \\ A_4 &= \left[\left(j+\frac{3}{2}\right)\Delta Z - Z_k\right]\left[r_k - \left(i+\frac{1}{2}\right)\Delta r\right] \\ \sum_{m=1}^{4} A_m &= \Delta r \Delta Z \end{aligned}\right\} \tag{4-2-26}$$

所以

$$\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_{eff}^{n+1} = \frac{1}{\Delta r \Delta Z}\left(A_1\begin{bmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{bmatrix}_{i+1,j+1} + A_2\begin{bmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{bmatrix}_{i,j+1} + A_3\begin{bmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{bmatrix}_{ij} + A_4\begin{bmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{bmatrix}_{i+1,j}\right) \tag{4-2-27}$$

若 p_k 点位于 2,3,4 区，其计算类似.

4.2.5 输运计算

(1)定质点 p_k 的坐标 (r_k^{n+1}, Z_k^{n+1})

$$\left.\begin{aligned} r_k^{n+1} &= r_k^n + u_{eff}\Delta t \\ Z_k^{n+1} &= Z_k^n + v_{eff}\Delta t \end{aligned}\right\} \tag{4-2-28}$$

若 p_k 离开了原来的(i,j)网格，则带走了：

$$\left.\begin{aligned} &\text{质量：} & \Delta m_k &= m_k \\ &\text{动量：} & \Delta\tilde{X}_k &= m_k\tilde{u}_{ij} \\ & & \Delta\tilde{Y}_k &= m_k\tilde{v}_{ij} \\ &\text{能量：} & \Delta ET &= m_k\tilde{E}_{ij} \\ &\text{比能：} & \Delta E_k &= \frac{m_k}{M_{ij}^n}\tilde{E}_{ij} \end{aligned}\right\} \tag{4-2-29}$$

式中 $\frac{m_k}{M_{ij}^n}$ 为质量分数. 同时，从邻格进入了质点 p_k，则带进了上述各量，邻格一共有 8 个.

(2) $n+1$ 时刻的参量

质量：$$M_{ij}^{n+1} = M_{ij}^n - \sum_k m_k + \sum_{k'} m_{k'} \tag{4-2-30}$$

动量：$$\begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}_{ij}^{n+1} = M_{ij}^n\begin{bmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{bmatrix}_{ij} - \sum_k \begin{bmatrix} \Delta\tilde{X}_k \\ \Delta\tilde{Y}_k \end{bmatrix} + \sum_{k'} \begin{bmatrix} \Delta\tilde{X}_{k'} \\ \Delta\tilde{Y}_{k'} \end{bmatrix} \tag{4-2-31}$$

速度：$$\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}_{ij}^{n+1} = \begin{cases} \dfrac{1}{M_{ij}^{n+1}}\begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}_{ij}^{n+1} & (M_{ij}^{n+1} \neq 0) \\ 0 & (M_{ij}^{n+1} = 0) \end{cases} \tag{4-2-32}$$

总能量：$ET_{ij}^{n+1} = \widetilde{ET}_{ij} - \sum_{k} \Delta ET_k + \sum_{k'} \Delta ET_{k'}$ (4-2-33)

比能：$E_{ij}^{n+1} = (ET/M)_{ij}^{n+1}$ (4-2-34)

比内能：$e_{ij}^{n+1} = \left[E - \frac{1}{2}(u^2 + v^2)\right]_{ij}^{n+1}$ (4-2-35)

当 $M_{ij}^{n+1} = 0$ 时 E 和 e 均为零．最后求密度和压力：

$$\rho_{ij}^{n+1} = (M^{n+1}/\tau)_{ij} \tag{4-2-36}$$

压力由状态方程得

$$P_{ij}^{n+1} = f(\rho_{ij}^{n+1}, e_{ij}^{n+1}) \tag{4-2-37}$$

至此，对于纯格的一个时间周期内的各量已全部算出．

4.2.6 多种物质问题——混合网格计算

如果一个网格内同时存在有两种或两种以上的物质，则把该网格叫做混合网格（mixed cell）．现以两种物质为例，一种记作“·”另一种记作“×”见图 4-2-1．对于混合格中各量的计算，象拉氏计算、质点坐标确定以及一个质点带走的质量、动量这些方法和上述纯格中的计算一样，但格子总内能增量 ΔQ 须按照体积的百分数来分配，因为

$$\Delta Q_{ij} = M_{ij}^n(\tilde{e} - e^n)_{ij} \tag{4-2-38}$$

“·”物质的体积百分数为 $(M_{\cdot}^n / \rho_{\cdot}^n \tau)_{ij}$．所以

$$M_{\cdot ij}^n(\tilde{e}_{\cdot} - e_{\cdot}^n)_{ij} = \left(\frac{M_{\cdot}^n}{\rho_{\cdot}^n \tau}\Delta Q\right)_{ij} \tag{4-2-39}$$

$$\widetilde{ET}_{\cdot ij} = M_{\cdot ij}^n\left[\tilde{e}_{\cdot} + \frac{1}{2}(\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2)\right]_{ij} \tag{4-2-40}$$

一个质点带走的总能量

$$\Delta ET_{k\cdot} = \frac{M_{k\cdot}}{M_{\cdot ij}^n}\widetilde{ET}_{\cdot ij} \tag{4-2-41}$$

所以

$$ET_{\theta ij}^{n+1} = \widetilde{ET}_{\theta ij} - \sum_{k_\theta}\Delta ET_{k_\theta} + \sum_{k'_\theta}\Delta ET_{k'_\theta} \tag{4-2-42}$$

式中 θ 为·或×，对于混合格，

$$ET_{ij}^{n+1} = ET_{\cdot ij}^{n+1} + ET_{\times ij}^{n+1} \tag{4-2-43}$$

$$M_{\theta ij}^{n+1} = M_{\theta ij}^n - \sum_{k_\theta} M_{k_\theta} + \sum_{k'_\theta} M_{k'_\theta} \tag{4-2-44}$$

$$M_{ij}^{n+1} = M_{\cdot ij}^{n+1} + M_{\times ij}^{n+1}$$

$$\begin{bmatrix}\Delta\tilde{X}\\ \Delta\tilde{Y}\end{bmatrix}_{\theta ij} = m_{k_\theta}\begin{bmatrix}\tilde{u}\\ \tilde{v}\end{bmatrix}_{ij} \tag{4-2-45}$$

$$\begin{bmatrix}X\\ Y\end{bmatrix}_{ij}^{n+1} = M_{ij}^n\begin{bmatrix}\tilde{u}\\ \tilde{v}\end{bmatrix}_{ij} - \sum_{k\cdot}\begin{bmatrix}\Delta\tilde{X}\\ \Delta\tilde{Y}\end{bmatrix}_{\cdot ij} + \sum_{k'\cdot}\begin{bmatrix}\Delta\tilde{X}\\ \Delta\tilde{Y}\end{bmatrix}_{\cdot ij}$$

$$-\sum_{k_\times}\begin{bmatrix}\Delta\tilde{X}\\ \Delta\tilde{Y}\end{bmatrix}_{\times ij}+\sum_{k\times}\begin{bmatrix}\Delta\tilde{X}\\ \Delta\tilde{Y}\end{bmatrix}_{\times ij} \tag{4-2-46}$$

$$\begin{bmatrix}u\\ v\end{bmatrix}_{ij}^{n+1}=\begin{cases}\dfrac{1}{M_{ij}^{n+1}}\begin{bmatrix}X\\ Y\end{bmatrix}_{ij}^{n+1} & (M_{ij}^{n+1}\neq 0)\\ 0 & (M_{ij}^{n+1}=0)\end{cases} \tag{4-2-47}$$

$$E_{\theta ij}^{n+1}=\left(\frac{ET_\theta}{M_\theta}\right)_{ij}^{n+1} \tag{4-2-48}$$

$$e_{\theta ij}^{n+1}=\left[E_\theta-\frac{1}{2}(u^2+v^2)\right]_{ij}^{n+1} \tag{4-2-49}$$

下面求 P_{ij}^{n+1}、$\rho_{\cdot ij}^{n+1}$、和 $\rho_{\times ij}^{n+1}$，在此仍采用二种物质的格子内压力相等的原则.

$$\left(\frac{M_\cdot}{\rho_\cdot}+\frac{M_\times}{\rho_\times}\right)_{ij}^{n+1}=\tau_{ij} \tag{4-2-50}$$

$$P_{ij}^{n+1}=f(\rho,e)_{\cdot ij}^{n+1} \tag{4-2-51}$$

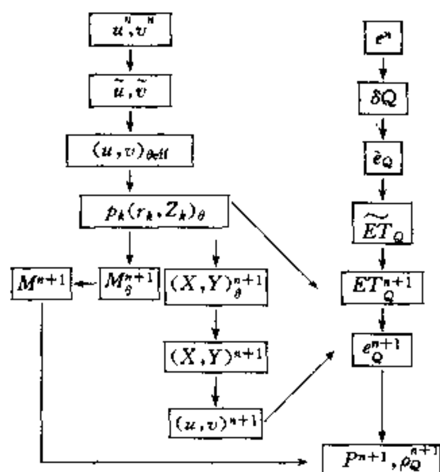
$$P_{ij}^{n+1}=f(\rho,e)_{\times ij}^{n+1} \tag{4-2-52}$$

由上述三式求出三个未知量.密度由下式求出

$$\rho_{ij}^{n+1}=\left(\frac{M^{n+1}}{\tau}\right)_{ij} \tag{4-2-53}$$

以上混合格计算可用下面框面表示(见表 4-2-1).

表 4-2-1　混合格计算框图



4.2.7　计算汇总

为了清楚起见，将计算各量所用到的公式列出简表，列于表 4-2-2，表 4-2-3 中，实际计算时，还要加上各种边界条件的处理和稳定性的考虑等.

表 4-2-2 纯格中计算各量用到的公式(4-2-?)

计算量	$\tilde{u}$	$\tilde{v}$	$\tilde{e}$	$\tilde{E}$	$\tilde{ET}$	q^{n+1}	$u_{i,eff}^{n+1}$	$v_{i,eff}^{n+1}$	r_{i}^{n+1}
公式号	17	18	20	25	24	19	27	27	28
计算量	Z_{i}^{n+1}	M_{*}^{n+1}	u^{n+1}	v^{n+1}	ET^{n+1}	E^{n+1}	e^{n+1}	ρ^{n+1}	P^{n+1}
公 式	28	30	32	32	33	34	35	36	37

表 4-2-3 混合格中计算各量用到的公式(4-2-?)

<table>
<tr><td>计算量</td><td colspan="1">$\tilde{u}$</td><td colspan="2">$\tilde{v}$</td><td colspan="1">$\tilde{e}$</td><td colspan="2">$\tilde{E}$</td><td colspan="2">$\widetilde{ET}$</td><td colspan="4">$\tilde{e}_{*}.\tilde{e}_{\times}$</td><td colspan="3">$\widetilde{ET}_{*}.\widetilde{ET}_{\times}$</td></tr>
<tr><td>公式号</td><td colspan="1">17</td><td colspan="2">18</td><td colspan="1">20</td><td colspan="2">25</td><td colspan="2">24</td><td colspan="4">39</td><td colspan="3">40</td></tr>
<tr><td>计算量</td><td colspan="3">$\Delta ET_{*}.\Delta ET_{\times}$</td><td colspan="3">$ET_{*}^{n+1}ET_{\times}^{n+1}$</td><td colspan="1">$ET^{n+1}$</td><td colspan="2">$u^{n+1}$</td><td colspan="2">$v^{n+1}$</td><td colspan="4">$M_{*}^{n+1}M_{\times}^{n+1}$</td></tr>
<tr><td>公式号</td><td colspan="3">41</td><td colspan="3">42</td><td colspan="1">43</td><td colspan="2">47</td><td colspan="2">47</td><td colspan="4">30</td></tr>
<tr><td>计算量</td><td colspan="2">$E_{*}^{n+1}E_{\times}^{n+1}$</td><td colspan="3">$e_{*}^{n+1}e_{\times}^{n+1}$</td><td colspan="5">$P^{n+1}\rho_{*}^{n+1}\rho_{\times}^{n+1}$</td><td colspan="2">$\rho^{n+1}$</td><td colspan="2">$q^{n+1}$</td><td colspan="1">$M^{n+1}$</td></tr>
<tr><td>公式号</td><td colspan="2">48</td><td colspan="3">49</td><td colspan="5">50,51,52</td><td colspan="2">53</td><td colspan="2">19</td><td colspan="1">44</td></tr>
</table>

至此，已算完一个时间步，如此循环下去.

4.2.8 炸药爆炸效应

假设有一平面爆轰波从下向上传播，我们首先定出两根线，参见图 4-2-5，一根是旧线，(Old line)，该线所越过的网格中的炸药已经爆炸，离旧线距离 $D\Delta t$ 处有另一根新线(New line)，D 是炸药爆速，新线如果越过网格的中心点，则该网格在本时间步中释放爆炸能，网格比内能改为

$$\tilde{e}_{ij}+\left(\frac{M_e}{M}\right)_{ij}^{n}K \qquad (4\text{-}2\text{-}54)$$

式中 M_e 为炸药质量，K 为单位质量炸药的爆炸能，对于 B 炸药，$K=0.04789\text{cm}^2/\mu\text{s}^2$，$D=0.7991\text{cm}/\mu\text{s}$. 在 n 时刻新线坐标 Z_{Nl}^{n} 和旧线坐标 Z_{ol}^{n} 的关系为

$$Z_{Nl}^{n}=Z_{ol}^{n}+D\Delta t \qquad (4\text{-}2\text{-}55)$$

在 $n+1$ 时刻则

$$Z_{ol}^{n+1}=Z_{Nl}^{n}$$

$$Z_{Nl}^{n+1}=Z_{Nl}^{n}+D\Delta t \qquad (4\text{-}2\text{-}56)$$

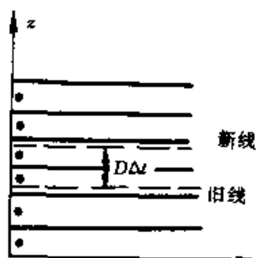


图 4-2-5 爆炸效应计算

如果新线没有越过网格中心点，则该网格炸药不释放爆炸能.

4.2.9 稳定性

由C-F-L条件

$$C\frac{\Delta t}{\Delta r}<1$$
$$C\frac{\Delta t}{\Delta Z}<1 \tag{4-2-57}$$

式中C为音速.由于质点运动不能在Δt期间越过两个网格,故有

$$u_{eff}\frac{\Delta t}{\Delta r}<1$$
$$u_{eff}\frac{\Delta t}{\Delta Z}<1 \tag{4-2-58}$$

另外,对于质点的初始布置也要注意,若像图4-2-6那样均匀布置,容易出现计算不稳定,若像

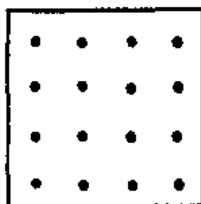


图4-2-6 初始网格均匀布置

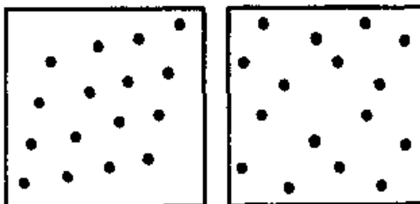


图4-2-7 初始网格错开布置

图4-2-7那样错开布置,则要稳定得多.

4.2.10 PIC方法讨论及算例

PIC方法的特点是将控制方程组分成压力效应步和输运步来计算,而后者用有限质点的进出网格来实现.它适合于计算多种材料的可压缩流的超音速流动,适合于全流场图像的数值模拟.对于多种材料的内界面不能清晰显示,由于格式粘性项为$\frac{1}{2}\rho|u|\Delta r$和$\frac{1}{2}\rho|u|\Delta Z$,当低速流动时,格式粘性项太小易产生不稳定.

PIC方法由于要进行网格量和质点量的两套计算,因此内存和机时比普通欧拉法要大得多.总的说来,PIC方法解题适应能力强,应用较广泛,下面介绍两个算例.B炸药药块如图4-2-8,药块高30mm,上面有一个宽20mm,深15mm的凹槽,爆轰波自下边界向上传播,图中给出了不同时刻爆轰产物汇聚情况.图4-2-9是一个直径为20mm的铁球以30mm/μs超高速碰撞铝靶的计算图像,可以看出弹和靶的变形情况和靶中冲击波运动情况,由于目前实验技术尚无法得到如此超高速的碰撞图像,计算结果更具有参考价值.

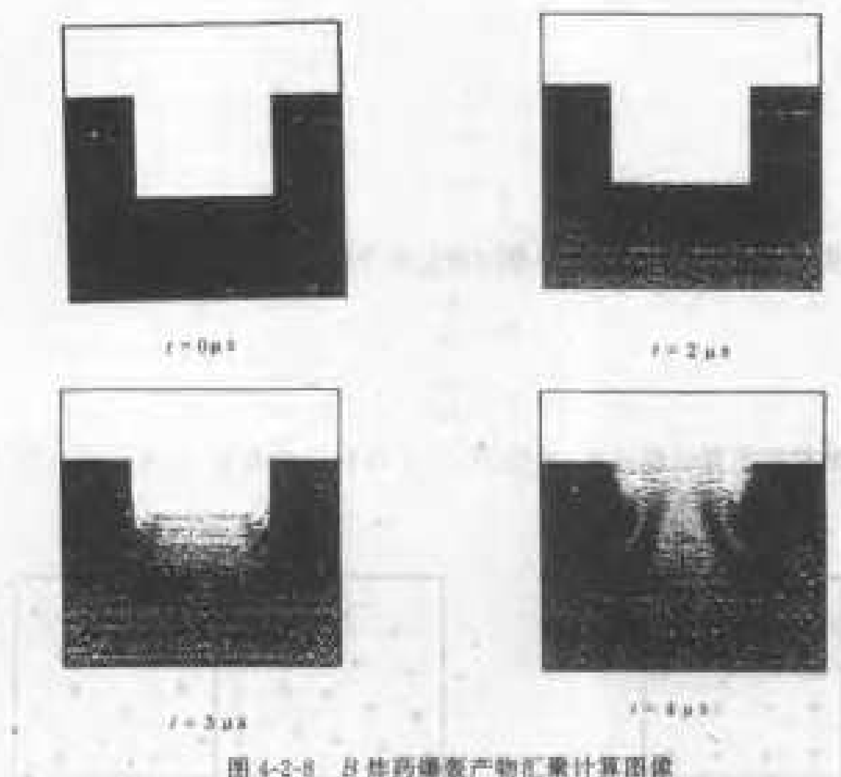


图 4-2-8 B炸药爆轰产物汇聚计算图像

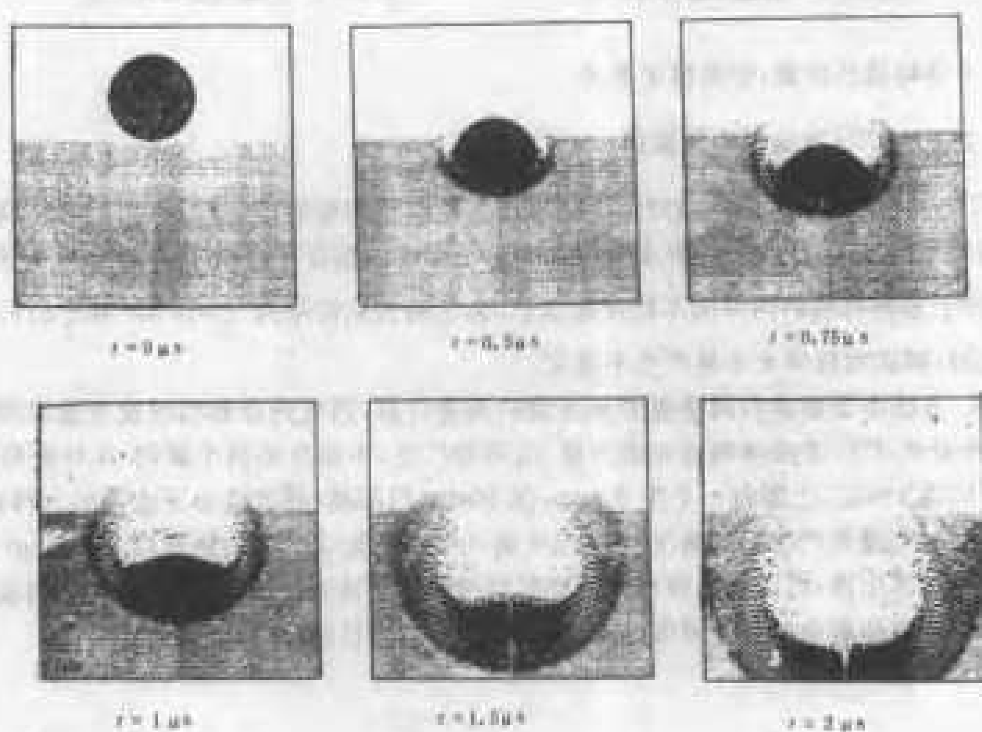


图 4-2-9 铁球超高速碰撞铝靶计算图像

4.2.11 PIC 方法的改进

PIC 方法在应用中不断改进，Wen Ho Lee 和 Dochan Kwak 提出了适用于弹塑性流动的 PIC 方法[3]，能够考虑材料的熔化和断裂. 而且将原来的一阶精度格式提高到接近二阶精度.

控制方程组为二维不定常轴对称或平面对称流体弹塑性方程组，坐标用 r,z,θ 计算按拉格朗日步和质点离散输运步两大步进行，在拉格朗日步中分三小步进行，设已知 n 时刻所有量.

(1) 计算 $n+\frac{1}{2}$ 时刻压力 $P^{n+\frac{1}{2}}$ 和应力偏量 $S^{n+\frac{1}{2}}$；

(2) 由 $P^{n+\frac{1}{2}}$ 和 $S^{n+\frac{1}{2}}$ 计算速度分量的试探值 $\tilde{u}$ 和 $\tilde{v}$，计算比内能试探值 $\tilde{I}$，然后计算应力偏量试探值 $\tilde{S}$；

(3) 计算网格动量和内能试探值 $M\tilde{u}$、$M\tilde{v}$ 和 $M\tilde{I}$，式中 M 为网格质量.

下面介绍径向动量的离散计算格式. 径向动量方程

$$\rho\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial}{\partial r}\sigma_r+\frac{\partial}{\partial z}\tau+\frac{\alpha}{r}(\sigma_r-\sigma_\theta) \tag{4-2-59}$$

采用"和"分裂格式，分 r 和 z 两个方向分别离散化

$$\rho\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial}{\partial r}\sigma_r+\frac{\alpha}{r}(\sigma_r-\sigma_\theta) \tag{4-2-60}$$

$$\rho\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\tau}{\partial z} \tag{4-2-61}$$

式中 σ_r 和 σ_θ 为正应力，τ 为剪应力，每隔一个计算时间步，变换分裂方向的次序. α 在轴对称时

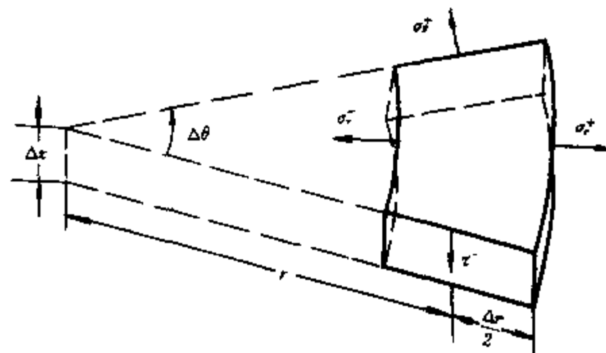


图 4-2-10 考虑弹塑性的 PIC 法的控制元

为 1，平面对称时为零. 对控制元积分(4-2-60)式，参见图 4-2-10，然后再对时间积分得

$$\tilde{u}-u^n=\int_0^{\Delta t}\left\{\frac{\left[\sigma_r^+\left(r+\frac{\Delta r}{2}\right)-\sigma_r^-\left(r-\frac{\Delta r}{2}\right)\right]\Delta\theta\Delta z}{\Delta r r\Delta\theta\Delta z\rho}+\frac{\alpha}{\rho r}(\sigma_r-\sigma_\theta)\right\}\mathrm{d}t$$

$$=\int_0^{\Delta t}\left[\frac{\sigma_r^+-\sigma_r^-}{\Delta r\rho}+\frac{\sigma_r^++\sigma_r^-}{2r\rho}+\frac{\alpha}{\rho r}(\sigma_r-\sigma_\theta)\right]\mathrm{d}t$$

$$= \left[\frac{\Delta t}{\rho}\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\Delta t \sigma_r}{r\rho} + \frac{\Delta t \alpha}{\rho r}(\sigma_r - \sigma_\theta)\right]^{n+\frac{1}{2}} \tag{4-2-62}$$

和原 PIC 方法一样，应力、压力、密度、速度等量都定义在格心.

以上为 r 方向离散，再考虑 z 方向，由(4-2-61)式得

$$\tilde{u} = \tilde{\tilde{u}} + \left(\frac{\Delta t}{\rho}\frac{\partial \tau}{\partial z}\right)^{n+\frac{1}{2}} \tag{4-2-63}$$

$\tilde{u}$即为拉格朗日步计算得到的试探值.

经过改进的 PIC 方法能够处理流体弹塑性问题，从而扩大了应用范围，而且提高了计算精度. 对于铜半球罩射流形成过程，先用二维拉格朗日方法计算 15μs，由于变形大，很难再计算下去，用改进的 PIC 方法继续计算得到了不同时刻射流和杵形状见图 4-2-11，计算得射流头部速度为 4.3mm/μs，而实测值为 4.22mm/μs，很为一致.

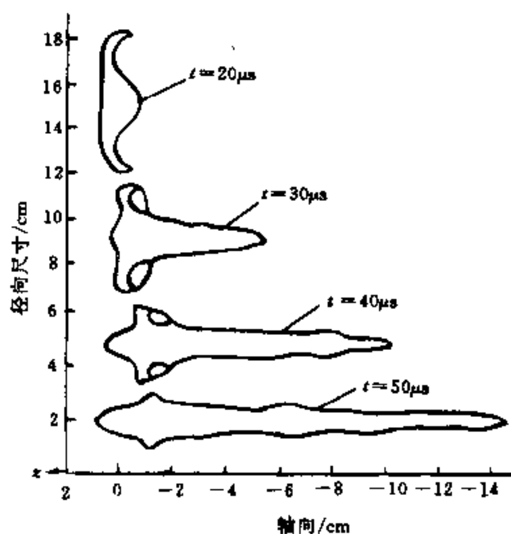


图 4-2-11 不同时刻的射流和杵形状

§4.3 流体网格法(Fluid in Cell)

流体网格法简称 FLIC 法，由 Rich（1963）提出，后来由 Gentry 等（1966）[4] 和 Белоцерковскпй 等(1971)相继发表，在俄罗斯称为大质点法. 本方法和 PIC 法一样，采用"和"分裂格式，分压力效应和输运两步进行差分计算，不同的是输运采用连续输运方法，从而省去了离散质点的繁琐计算.

4.3.1 网格设置与控制方程

对于柱坐标划分矩形网格，如图 4-3-1 所示，格子中心坐标为 x_i, r_j，格子体积

$$V_{ij} = 2\pi r_j \Delta x \Delta r$$

侧面积 $S_w = S_e = 2\pi r_j \Delta r$

上面积 $S_n = 2\pi r_{j+\frac{1}{2}} \Delta x$

下面积 $S_s = 2\pi r_{j-\frac{1}{2}} \Delta x$

ρ、u、v、P 和 e 均定义在格心，人工粘性 q 定义在格边.

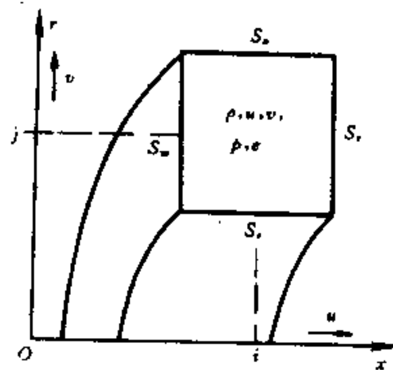


图 4-3-1 PLIC 法网格设置

控制方程为理想可压缩流体方程组

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} + \mathrm{div}\rho f u = g \tag{4-3-2}$$

$$f = \begin{bmatrix} 1 \\ u \\ v \\ e \end{bmatrix} \qquad g = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{\partial P}{\partial x} \\ -\frac{\partial P}{\partial r} \\ -P\mathrm{div}\boldsymbol{u} \end{bmatrix}$$

4.3.2 压力效应步

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(P + q) \tag{4-3-3}$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r}(P + q) \tag{4-3-4}$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} = -(P + q)\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}rv\right) \tag{4-3-5}$$

采用积分控制元离散方法，对(4-3-3)式两边作网格体积分，左边得

$$\iint_{V_{ij}} \frac{\partial \rho u}{\partial t}\mathrm{d}V = \int_{r_{j-\frac{1}{2}}}^{r_{j+\frac{1}{2}}}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \rho u}{\partial t}2\pi r\mathrm{d}x\mathrm{d}r$$

$$= \frac{\partial u_{ij}}{\partial t}\rho_{ij}^n V_{ij} = M_{ij}^n \frac{\tilde{u}_{ij} - u_{ij}^n}{\Delta\tau}$$

右边得

$$\int_{r_{j-\frac{1}{2}}}^{r_{j+\frac{1}{2}}}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} -\frac{\partial}{\partial x}(P + q)2\pi r\mathrm{d}x\mathrm{d}r$$

$$= -\int_{r_{j-\frac{1}{2}}}^{r_{j+\frac{1}{2}}} 2\pi\left[(P + q)_{i+\frac{1}{2},j} - (P + q)_{i-\frac{1}{2},j}\right]r\mathrm{d}r$$

$$= -S_e\left[(P + q)_{i+\frac{1}{2},j} - (P + q)_{i-\frac{1}{2},j}\right]$$

取 $P_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(P_i + P_{i+1})$

得(4-3-3)式的离散格式为

$$M_{ij}^n \frac{(\tilde{u} - u^n)_{ij}}{\Delta t} = -\left[\frac{1}{2}(P_{i+1} - P_{i-1}) + (q_{i+\frac{1}{2}} - q_{i-\frac{1}{2}})\right]_i^n S_e \tag{4-3-6}$$

由(4-3-4)式可边

$$-\int_{r_{j-\frac{1}{2}}}^{r_{j+\frac{1}{2}}}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial P}{\partial r}2\pi r\mathrm{d}x\mathrm{d}r = -2\pi\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}\int_{r_{j-\frac{1}{2}}}^{r_{j+\frac{1}{2}}}\left(\frac{\partial}{\partial r}Pr - P\right)\mathrm{d}r\mathrm{d}x$$

$$= -2\pi\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}\left[(Pr)_{j+\frac{1}{2}} - (Pr)_{j-\frac{1}{2}}\right]_i\mathrm{d}x + 2\pi P_{ij}\Delta x\Delta r$$

$$= -\left(P_{j+\frac{1}{2}}S_n - P_{j-\frac{1}{2}}S_s\right)_i + P_{ij}(S_n - S_s)$$

$$= -\frac{1}{2}\left[(P_{j+1} - P_j)S_n + (P_j - P_{j-1})S_s\right]_i$$

$$-\iint_{V_{ij}} \frac{\partial q}{\partial r}\mathrm{d}V = -2\pi r_j\left(q_{j+\frac{1}{2}} - q_{j-\frac{1}{2}}\right)_i\Delta x$$

$$= -\left(q_{j+\frac{1}{2}} - q_{j-\frac{1}{2}}\right)_i S_j^r$$

上式在积分中 r 取平均值 r_j，并且

$$S_j^r = 2\pi r_j \Delta x$$

(4-3-4)式的离散格式成为

$$M_{ij}^n \frac{(\tilde{v} - v^n)_{ij}}{\Delta t} = -\frac{1}{2}[(P_{j+1} - P_j)S_n + (P_j - P_{j-1})S_s]_i^n - (q_{j+\frac{1}{2}} - q_{j-\frac{1}{2}})_i^n S_j^r \qquad (4\text{-}3\text{-}7)$$

(4-3-5)式右边的离散较复杂，P 和 q 分开求.

$$\iint_{V_{ij}} -P\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}rv\right)\mathrm{d}V = -2\pi P_{ij}\left[\int_{r_{j-\frac{1}{2}}}^{r_{j+\frac{1}{2}}}(u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}})r\mathrm{d}r + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}(r_{j+\frac{1}{2}}v_{j+\frac{1}{2}} - r_{j-\frac{1}{2}}v_{j-\frac{1}{2}})\mathrm{d}x\right]$$

$$= -P_{ij}[(u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}})_j S_e + (v_{j+\frac{1}{2}}S_n - v_{j-\frac{1}{2}}S_s)_i]$$

$$-\iint_{V_{ij}} q\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}V = \iint_{V_{ij}}\left(\frac{\partial}{\partial x}qu - u\frac{\partial q}{\partial x}\right)\mathrm{d}V$$

$$= -\pi[(qu)_{i+\frac{1}{2}} - (qu)_{i-\frac{1}{2}}]_j(r_{j+\frac{1}{2}} + r_{j-\frac{1}{2}})\Delta r + \pi u_{ij}(q_{i+\frac{1}{2}} - q_{i-\frac{1}{2}})_j(r_{j+\frac{1}{2}} + r_{j-\frac{1}{2}})\Delta r$$

$$= -\frac{1}{2}S_e[q_{i+\frac{1}{2}}(u_{i+1} - u_i) + q_{i-\frac{1}{2}}(u_i - u_{i-1})]_j$$

$$-\iint_{V_{ij}} q\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}rv\mathrm{d}V = -\iint_{V_{ij}}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}rvq - v\frac{\partial q}{\partial r}\right)\mathrm{d}V$$

$$= -2\pi[(rvq)_{j+\frac{1}{2}} - (rvq)_{j-\frac{1}{2}}]_i\Delta x + 2\pi r_j v_{ij}(q_{j+\frac{1}{2}} - q_{j-\frac{1}{2}})_i\Delta x$$

$$= -\frac{1}{2}[q_{j+\frac{1}{2}}(S_{j+1}^r v_{j+1} - S_j^r v_j) + q_{j-\frac{1}{2}}(S_j^r v_j - S_{j-1}^r v_{j-1})]_i$$

(4-3-5)式离散格式成为

$$M_{ij}^n \frac{(\tilde{e} - e^n)_{ij}}{\Delta t} = -P_{ij}^n[(\bar{u}_{i+\frac{1}{2}} - \bar{u}_{i-\frac{1}{2}})_j S_e + \bar{v}_{i,j+\frac{1}{2}}S_n - \bar{v}_{i,j-\frac{1}{2}}S_s]$$
$$-\frac{1}{2}[q_{i+\frac{1}{2}}^n(\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i) - q_{i-\frac{1}{2}}^n(\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1})]_j S_e$$
$$-\frac{1}{2}[q_{j+\frac{1}{2}}(S_{j+1}^r\bar{v}_{j+1} - S_j^r\bar{v}_j) + q_{j-\frac{1}{2}}(S_j^r\bar{v}_j - S_{j-1}^r\bar{v}_{j-1})]_i \qquad (4\text{-}3\text{-}8)$$

式中

$$\bar{u} = \frac{1}{2}(\tilde{u} + u^n)$$

$$\bar{v} = \frac{1}{2}(\tilde{v} + v^n)$$

人工粘性由下式给出

$$q_{i+\frac{1}{2},j}^n = \begin{cases} B(\rho c)_{i+\frac{1}{2},j}^n(u_i - u_{i+1})_j & \text{当 } u_{ij}^n > u_{i+1,j}^n, \\ & (u^2 + v^2)_{i+\frac{1}{2},j}^n < k(c^2)_{i+\frac{1}{2},j}^n \\ 0 & \text{否则} \end{cases}$$

$$q^n_{i,j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} B(\rho c)^n_{i,j+\frac{1}{2}}(v_j - v_{j+1})_i & \text{当 } v^n_{ij} > v^n_{i,j+1} \\ & (u^2+v^2)^n_{i,j+\frac{1}{2}} < k(c^2)^n_{i,j+\frac{1}{2}} \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \tag{4-3-9}$$

式中 B、k 为给定的常数，c 为音速. 当流速很大时，格式粘性就够了，可取 $q=0$.

4.3.3 输运步

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} + \mathrm{div}\rho f \boldsymbol{u} = 0 \tag{4-3-10}$$

对 ij，网格作体积分

$$\iint_{V_{ij}} \mathrm{div}\rho f \boldsymbol{u} \mathrm{d}v = \int \rho f \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}s$$

$$= \left[(\rho f u)_{i+\frac{1}{2}} - (\rho f u)_{i-\frac{1}{2}}\right]_j S_e + (\rho f v)_{i,j+\frac{1}{2}} S_n - (\rho f v)_{i,j-\frac{1}{2}} S_s \tag{4-3-11}$$

上式中 $\boldsymbol{n}$ 为输运面的法向单位向量，上式的物理意义可由图 4-3-2(a)表示向上和向右的输运面积，面实际输运面积应为图 4-3-2(b)中斜线面积，其中有部分面积已输入到 $i+1$，$j+1$ 网格，而(a)输运中则没有，其误差是 $O(\Delta t^2)$. (4-3-11)式中 $\rho f u$ 和 $\rho f v$ 均为格边量，而原定义为格心量. 下面讨论取法，以右边面积 S_e 的输运值 $\rho f u$ 为例进行，即 i 和 $i+1$ 格之间的输运量.

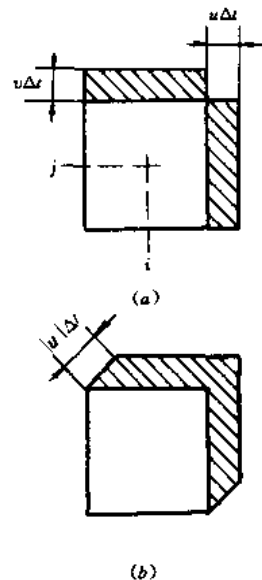


图 4-3-2 输运面积
(a)式输运面积；
(b)实际输运面积

(1) 算术平均法

$$(\rho f u)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\left[(\rho f u)_i + (\rho f u)_{i+1}\right] \tag{4-3-12}$$

(2) 贡献网格法，也称 DA 法

若 $$u_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_i + u_{i+1}) > 0 \tag{4-3-13}$$

则 i 格为贡献网格(Donor Cell)，$i+1$ 格为接受网格(Acceptor Cell)，格边值取贡献网格值，在此取$(\rho f u)_i$，若 $u_{i+\frac{1}{2}}<0$ 则$i+1$ 格为贡献网格，格边值取$(\rho f u)_{i+1}$. DA 法可由下式计算

$$(\rho f u)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(1 + \mathrm{sgn}\, u_{i+\frac{1}{2}})(\rho f u)_i + \frac{1}{2}(1 - \mathrm{sgn} u_{i+\frac{1}{2}})(\rho f u)_{i+1} \tag{4-3-14}$$

式中 $\mathrm{sgn} u_{i+\frac{1}{2}}$ 定义如下

$$\mathrm{sgn} u_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \quad \text{当 } u_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} >0 \\ =0 \\ <0 \end{cases} \tag{4-3-15}$$

(3) 部分 DA 法

ρf 用 DA 法，u 用算术平均法，得

$$(\rho f u)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}\left[(1 + \mathrm{sgn} u_{i+\frac{1}{2}})(\rho f)_i + (1 - \mathrm{sgn} u_{i+\frac{1}{2}})(\rho f)_{i+1}\right](u_i + u_{i+1}) \tag{4-3-16}$$

(4) 交错型

$$(\rho fu)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}[(\rho f)_i u_{i+1} + (\rho f)_{i+1} u_i] \tag{4-3-17}$$

(5)线性插值法

设 ρ,f 和 u 值在 i 和 $i+1$ 之间呈线性分布，如图 4-3-3 所示，设 i 格为贡献网格，ρf 取输运宽度 $u\Delta t$ 的中间值，即

$$\rho f = (\rho f)_i + [(\rho f)_{i+1} - (\rho f)_i]\frac{\Delta x - u\Delta t}{\Delta x}$$

$$= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{u\Delta t}{\Delta x}\right)(\rho f)_i + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{u\Delta t}{\Delta x}\right)(\rho f)_{i+1} \tag{4-3-18}$$

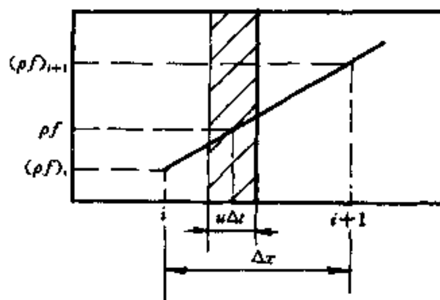


图 4-3-3　ρf 的线性插值取法

上式中 u 均取 $\frac{1}{2}(u_i + u_{i+1})$. 另一种方法是 u 也取线性插值，即

$$u = u_i + (u_{i+1} - u_i)\frac{0.5\Delta x - u\Delta t}{\Delta x}$$

解得

$$u = \frac{u_i + u_{i+1}}{2\left[1 + \frac{(u_{i+1} - u_i)\Delta t}{\Delta x}\right]} \tag{4-3-19}$$

上述各种取法的选择取决于对截断误差和稳定性的考虑.(1)和(4)相当于中心差分，是二阶精度，但是稳定性差，需要加人工粘性.(2)和(3)是一阶精度，稳定性好.

为了书写方便，令

$$(T\rho f)_{ij} = \iint_{V_{ij}} \mathrm{div}\rho f u \mathrm{d}V \tag{4-3-20}$$

由(4-3-10)式得

$$\iint_{V_{ij}} \frac{\partial \rho f}{\partial t}\mathrm{d}V = -(T\rho f)_{ij}$$

质量守恒

$$\iint_{V_{ij}} \frac{\partial \rho}{\partial t}\mathrm{d}V = -(T\rho f)_{ij}$$

$$\rho_{ij}^{n+1} = \rho_{ij}^n - \frac{\Delta t}{V_{ij}}(T\rho^n)_{ij} \tag{4-3-21}$$

动量守恒：

网格质量 M_{ij}，显然有

$$M_{ij}^{n+1} = \rho_{ij}^{n+1} V_{ij} \tag{4-3-22}$$

对于 x 方向动量方程，有

$$\iint_{V_{ij}} \frac{\partial \rho u}{\partial t}\mathrm{d}V = \frac{(\rho u)_{ij}^{n+1} - (\rho u)_{ij}^n}{\Delta t} V_{ij} = \frac{1}{\Delta t}[(Mu)^{n+1} - (Mu)^n]_{ij}$$

最后得

$$u_{ij}^{n+1} = \left(\frac{M^n\tilde{u}}{M^{n+1}}\right)_{ij} - \frac{\Delta t}{M_{ij}^{n+1}}(T\rho^n\tilde{u})_{ij} \tag{4-3-23}$$

对于 r 方向动量方程得

$$v_{ij}^{n+1} = \left(\frac{M^n\tilde{v}}{M^{n+1}}\right)_{ij} - \frac{\Delta t}{M_{ij}^{n+1}}(T\rho^n\tilde{v})_{ij} \tag{4-3-24}$$

对于能量守恒得

$$e_{ij}^{n+1} = \left(\frac{M^n\tilde{e}}{M^{n+1}}\right)_{ij} - \frac{\Delta t}{M_{ij}^{n+1}}(T\rho^n\tilde{e})_{ij} \tag{4-3-25}$$

也可以像 PIC 法中那样，先计算总能 E_{ij}^{n+1}，扣除比动能部分 $\left(\frac{1}{2}u^2 + \frac{1}{2}v^2\right)$ 得到比内能. 压力 P_{ij}^{n+1} 由状态方程 $P(\rho,e)_{ij}^{n+1}$ 得到. 至此完成一个循环步.

4.3.4 稳定性讨论

用 Hirt 启示性稳定性分析方法讨论一维情况，它可以代替二维的稳定性讨论. 在讨论时，可将上述二步离散格式消去带～的试探值，合成一个离散公式讨论. 下面仅对质量守恒离散式进行讨论. 一维质量守恒方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\rho u = 0 \tag{4-3-26}$$

用部分 DA 法离散格式，并取

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_i + u_{i+1}) \tag{4-3-27}$$

得

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{4h}[(\rho_i + \rho_{i+1})(u_i + u_{i+1}) - (\rho_i + \rho_{i-1})(u_i + u_{i-1})]^n$$

$$= \frac{1}{4h}\left[Su_{i+\frac{1}{2}}(\rho_{i+1} - \rho_i)(u_i + u_{i+1}) - Su_{i-\frac{1}{2}}(\rho_i - \rho_{i-1})(u_i + u_{i-1})\right]^n \tag{4-3-28}$$

上式对 i 点作泰勒展开，取

$$\tau = \Delta t,\ h = \Delta x,\ \rho_t = \frac{\partial\rho}{\partial t},\ \rho_{tt} = \frac{\partial^2\rho}{\partial t^2}\cdots \text{等}$$

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n + \tau(\rho t)_i + \frac{\tau^2}{2}(\rho_{tt})_i + \cdots$$

$$\rho_{i+1}^n = \rho_i^n + h(\rho_x)_i + \frac{h^2}{2}(\rho_{xx})_i + \cdots$$

$$\rho_{i-1}^n = \rho_i^n - h(\rho_x)_i + \frac{h^2}{2}(\rho_{xx})_i + \cdots$$

对于 u 的泰勒展开形式同上，代入(4-3-28)式，为了简化，去掉下标 i，且泰勒展开式中仅保留到二阶偏导数，得

$$\rho_t + \frac{\tau}{2}\rho_{tt} + \frac{1}{4h}\left[\left(2\rho^n + h\rho_x + \frac{h^2}{2}\rho_{xx}\right)\left(2u^n + hu_x + \frac{h}{2}u_{xx}\right)\right.$$

$$\left. - \left(2\rho^n - h\rho_x + \frac{h^2}{2}\rho_{xx}\right)\left(2u^n - hu_x + \frac{h}{2}u_{xx}\right)\right]$$

$$-\frac{1}{4h}\Big[Su^n_{i+\frac{1}{2}}\Big(h\rho_x+\frac{h^2}{2}\rho_{xx}\Big)\Big(2u^n+hu_x+\frac{h}{2}u_{xx}\Big)$$

$$-Su^n_{i-\frac{1}{2}}\Big(h\rho_x-\frac{h^2}{2}\rho_{xx}\Big)\Big(2u^n-hu_x+\frac{h}{2}u_{xx}\Big)\Big]=0 \qquad (4\text{-}3\text{-}29)$$

为了消去 ρ_{tt}，由(4 -3-26)式得

$$\rho_t=-(\rho u)_x$$

$$\rho_{tt}=-[(\rho u)_x]_t=-[(\rho u)_t]_x \qquad (4\text{-}3\text{-}30)$$

由一维动量守恒

$$(\rho u)_t+(\rho u^2)_x+P_x=0 \qquad (4\text{-}3\text{-}31)$$

代入(4-3-30)式得

$$\rho_{tt}=[(\rho u^2)_x+P_x]_x=2(\rho uu_x)_x+(u^2\rho_x)_x+(c^2\rho_x)_x \qquad (4\text{-}3\text{-}32)$$

式中 $c^2=P_\rho$

将(4-3-32)式代入(4-3-29)式消去 ρ_{tt} 得到带有差分余项的微分方程 MPDE

$$\rho_t+\frac{\tau}{2}[(u^2+c^2)^n\rho_x]_x+\tau(\rho uu_x)^n_x+(\rho u)^n_x+\frac{h^2}{4}(\rho_xu_{xx}+u_x\rho_{xx})^n$$

$$=Su^n_{i+\frac{1}{2}}\Big[\frac{u}{2}\rho_x+\frac{h}{4}(u\rho_x)_x+\frac{h^2}{8}(\rho_xu_{xx}+u_x\rho_{xx})\Big]^n$$

$$-Su^n_{i-\frac{1}{2}}\Big[\frac{u}{2}\rho_x-\frac{h}{4}(u\rho_x)_x+\frac{h^2}{8}(\rho_xu_{xx}-u_x\rho_{xx})\Big]^n=F \qquad (4\text{-}3\text{-}33)$$

上式右端以 F 表示，分三种情况：

(1) $u^n_{i+\frac{1}{2}}>0$，$u^n_{i-\frac{1}{2}}>0$，得 $F=\frac{h}{2}(u\rho_x)_x+\frac{h^2}{4}u_x\rho_{xx}$

(2) $u^n_{i+\frac{1}{2}}<0$，$u^n_{i-\frac{1}{2}}<0$，得 $F=-\frac{h}{2}(u\rho_x)_x-\frac{h^2}{4}u_x\rho_{xx}$

上述两种情况，(4-3-33)式成为

$$\rho_t+(\rho u)_x=\frac{1}{2}\Big[\Big(h-\tau|u|-\frac{\tau c^2}{|u|}\Big)|u|\rho_x\Big]^n_x-\tau(\rho uu_x)^n_x-\frac{h^2}{4}(\rho_xu_x)_x$$

上式等号右边第一项为格式粘性项，由稳定性条件应为正，即

$$h-\tau|u|-\frac{\tau c^2}{|u|}>0$$

$$\tau<\frac{h|u|}{u^2+c^2} \qquad (4\text{-}3\text{-}34)$$

由上式可见，如果速度较小，则粘性项小，步长将取得很小，为此要增加人工粘性项.

(3) $u^n_{i+\frac{1}{2}}<0$，$u^n_{i-\frac{1}{2}}>0$，(4-3-33) 式成为

$$\rho_t+(\rho u)_x=-\frac{h^2}{2}(u_x\rho_x)_x-\frac{\tau}{2}(c^2\rho_x)_x-\tau(\rho uu_x)_x-u\rho_x$$

由于 u 值由负变到正，必存在 $u=0$，该处格式粘性项为负值，因此一定要加人工粘性项. 实际上，由于 ij 格仅与 4 个邻格有输运关系，因此位移 $|u|\tau$ 至少应小于 $h/2$，即

$$\tau<\frac{h}{2|u|} \qquad (4\text{-}3\text{-}35)$$

对于二维情况，稳定性条件取

$$\tau < \frac{1}{2}\min_{ij}\left\{\frac{\Delta x}{|u|}, \frac{\Delta r}{|v|}, \frac{\Delta x}{c}, \frac{\Delta r}{c}\right\} \tag{4-3-36}$$

4.3.5 总能量守恒检验

记 E^{n+1} 为计算目标区的计算总能量

$$E^{n+1} = \sum_{ij} E_{ij}^{n+1} \tag{4-3-37}$$

t^{n+1} 时刻实际总能量为 E_t^{n+1}，初始时刻总能量为 E_t^0。在 Δt 期间由边界格进入能 $\sum \Delta E_{in}$，流出能 $\sum \Delta E_{out}$，计算目标区为 x 方向从 $i=1$ 到 I，r 方向 j 从 1 到 J，外力对目标区作的功为

$$\begin{aligned}
&\text{西边界：} \sum_{w} (\Delta Pu)_{\frac{1}{2},j} S_w \Delta t = W_w \\
&\text{东边界：} \sum_{e} (\Delta Pu)_{I+\frac{1}{2},j} S_e \Delta t = W_e \\
&\text{南边界：} \sum_{s} (\Delta Pv)_{i,\frac{1}{2}} S_s \Delta t = W_s \\
&\text{北边界：} \sum_{n} (\Delta Pv)_{i,J+\frac{1}{2}} S_n \Delta t = W_n
\end{aligned} \tag{4-3-38}$$

E_t^{n+1} 为 E_t^0 和各个 Δt 计算步能量输运及作功的总和

$$E_t^{n+1} = E_t^0 + \Delta t \sum_{k=1}^{n+1} \left(\sum \Delta E_{in}^k - \sum \Delta E_{out}^k + W_w^k - W_e^k + W_s^k - W_n^k \right) \tag{4-3-39}$$

若

$$\frac{|E^{n+1} - E_t^{n+1}|}{E_t^{n+1}} < \varepsilon_E \tag{4-3-40}$$

式中 ε_E 为预先规定的允许误差，则计算继续进行下去.

4.3.6 PLIC 方法讨论

FLIC 方法和 PIC 方法一样，适合于计算有大变形的流场，由于采用了连续输运，内存和机时比 PIC 方法节省很多，缺点是只能计算单一种材料，使其应用受到了限制，为此发展了一系列处理混合网格的方法，以便于计算多种材料问题，同时也是为了更好的处理边界非矩形网格.

§4.4 GILA 方法和 MHEP 方法

这两种方法都属于欧拉型方法，但都能计算多介质的二维流体力学问题，它们在内界面显示以及输运计算中都有其独特之处.

4.4.1 GILA 方法

一、概述

这个方法是 F. H. Harlow、A. A. Amsden 1974 年提出的[5]，其特点有

(1) 差分计算分裂为拉氏、欧拉和扩散项三步计算，最后一步在此不介绍；

(2) 拉氏步用隐式格式，所以能够在低流速范围内计算，而前面几种格式都不宜算低速流问题；

(3) 输运计算用连续输运（类似于 FILC 法）和离散输运（类似于 PIC 法）相结合的方法，在内界

面两侧若干个网格内布置标记点，可以显示内界面. 同时，和 PIC 方法比较，又节省了内存和机时.

现以二维平面问题为例，且系统中只有两种材料，记为“·”和“×”，变量 ρ, e, P 定义在格心，u, v 定义在格边，见图 4-4-1，网格厚度为 1，体积为

$$V_{ij} = \Delta x \Delta y$$

图 4-4-1 GILA 法变量配置

二、拉氏步计算

基本方程在体元上积分得

$$\frac{dV}{dt} = \oint \vec{u} \cdot \vec{n} dS \tag{4-4-1}$$

$$M \frac{d\vec{u}}{dt} = - \oint P \cdot \vec{n} dS \tag{4-4-2}$$

$$M \frac{de}{dt} = - P \frac{dV}{dt} \tag{4-4-3}$$

对于混合格，质量有 $M_{\cdot i,j}, M_{\times i,j}$，相应体积为 $V_{\cdot i,j}, V_{\times i,j}$，凡 $t = t^n$ 时刻的量，右上角 n 都省去. 由 (4-4-1)～(4-4-3)式有

$$\frac{1}{\Delta t}[(\tilde{V} - V)_{\cdot i,j} + (\tilde{V} - V_{\times i,j})] = (\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j})\Delta y + (\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}})\Delta x \tag{4-4-4}$$

$$M_{i+\frac{1}{2},j} \frac{(\tilde{u} - u)_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta t} = -(\tilde{P}_{i+1,j} - \tilde{P}_{ij})\Delta y \tag{4-4-5}$$

$$M_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{(\tilde{v} - v)_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = -(\tilde{P}_{i,j+1} - \tilde{P}_{ij})\Delta x \tag{4-4-6}$$

$$M_{\cdot ij}(\tilde{e} - e)_{\cdot ij} = -\tilde{P}_{ij}(\tilde{V} - V)_{\cdot ij} \tag{4-4-7}$$

$$M_{\times ij}(\tilde{e} - e)_{\times ij} = -\tilde{P}_{ij}(\tilde{V} - V)_{\times ij} \tag{4-4-8}$$

状态方程

$$\tilde{P}_{ij} = f_{\cdot}\left(\frac{M}{\tilde{V}}, \tilde{e}\right)_{\cdot ij} \tag{4-4-9}$$

$$\tilde{P}_{ij} = f_{\times}\left(\frac{M}{\tilde{V}}, \tilde{e}\right)_{\times ij} \tag{4-4-10}$$

(4-4-4)]～(4-4-10)式共 7 个方程，7 个未知量：$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}, \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}, \tilde{P}_{ij}, \tilde{V}_{\cdot ij}, \tilde{V}_{\times ij}, \tilde{e}_{\cdot ij}, \tilde{e}_{\times ij}$，所以是封闭的，但得不出显式公式，只有迭代. 现介绍 Chorin，Hirt 迭代方法.

对某量 Z，$\nu+1$ 次迭代值为 Z^*，ν 次迭代为 Z，即

$$\tilde{Z}^* = \tilde{Z} + \delta Z \tag{4-4-11}$$

将(4-4-5)、(4-4-6)式代入(4-4-4)式消去 $\tilde{u}, \tilde{v}$，并将 $\tilde{V}_{\cdot ij}, \tilde{V}_{\times ij}, \tilde{P}_{ij}$ 右上角加上“*”号，得

$$\frac{1}{\Delta t}[(\tilde{V}^* - V)_{\cdot ij} + (\tilde{V}^* - V)_{\times ij}] = (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j})\Delta y + (v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}})\Delta x - \Delta t(\Delta y)^2\left(\frac{\tilde{P}_{i+1,j} - \tilde{P}^*_{ij}}{M_{i+\frac{1}{2},j}} - \frac{\tilde{P}^*_{ij} - \tilde{P}_{i-1,j}}{M_{i-\frac{1}{2},j}}\right)$$

$$-\Delta t(\Delta x)^2\left(\frac{\widetilde{P}_{i,j+1}-\widetilde{P}^*_{i,j}}{M_{i,j+\frac{1}{2}}}-\frac{\widetilde{P}^*_{ij}-\widetilde{P}_{i,j-1}}{M_{i,j-\frac{1}{2}}}\right) \quad (4\text{-}4\text{-}12)$$

$$\left.\begin{aligned}\widetilde{V}^*_{\cdot ij}&=\widetilde{V}_{\cdot ij}+\delta\widetilde{V}_{\cdot ij}\\ \widetilde{V}^*_{\times ij}&=\widetilde{V}_{\times ij}+\delta\widetilde{V}_{\times ij}\\ \widetilde{P}^*_{ij}&=\widetilde{P}_{ij}+\delta\widetilde{P}_{ij}\end{aligned}\right\} \quad (4\text{-}4\text{-}13)$$

由

$$\left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_S=c^2=\frac{\partial P}{\partial V}\frac{\partial V}{\partial\rho}$$

而

$$V=\frac{M}{\rho}$$

所以

$$\frac{\partial V}{\partial\rho}=-\frac{V^2}{M}$$

因此

$$\delta V=\frac{1}{c^2}\frac{\partial V}{\partial\rho}\delta P=-\frac{V^2}{Mc^2}\delta P$$

$$\left.\begin{aligned}\delta\widetilde{V}_{\cdot ij}&=-\left(\frac{V^2}{Mc^2}\right)_{\cdot ij}\delta\widetilde{P}_{ij}\\ \delta\widetilde{V}_{\times ij}&=-\left(\frac{V^2}{Mc^2}\right)_{\times ij}\delta\widetilde{P}_{ij}\end{aligned}\right\} \quad (4\text{-}4\text{-}14)$$

将(4-5-13)、(4-5-14)式代入(4-5-12)式得

$$\delta\widetilde{P}_{ij}=\frac{D_{ij}}{H_{ij}}\Delta x\Delta y \quad (4\text{-}4\text{-}15)$$

式中

$$D_{ij}=\frac{1}{\Delta t\Delta x\Delta y}(\widetilde{V}_{\cdot}+\widetilde{V}_{\times}-V_{\cdot}-V_{\times})_{ij}-\frac{\widetilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}-\widetilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x}-\frac{\widetilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}-\widetilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y}$$

$$H_{ij}=\left[(\Delta y^2)\left(\frac{1}{M_{i+\frac{1}{2},j}}+\frac{1}{M_{i-\frac{1}{2},j}}\right)+(\Delta x^2)\left(\frac{1}{M_{i,j+\frac{1}{2}}}+\frac{1}{M_{i,j-\frac{1}{2}}}\right)\right]\Delta t$$
$$+\Delta t\left(\frac{V^2_{\cdot}}{M_{\cdot}c^2_{\cdot}}+\frac{V^2_{\times}}{M_{\times}c^2_{\times}}\right)_{ij}$$

迭代过程为：

(1) 求 D_{ij}，若 $|D_{ij}|<\epsilon$(某一给定值)，停止迭代；

(2) 求 δP_{ij}，得 $\widetilde{P}^*_{ij}$；

(3) 代入(4-5-5)、(4-5-6)式得 $\widetilde{u}^*_{i+\frac{1}{2},j}$，$\widetilde{v}^*_{i,j+\frac{1}{2}}$；

(4) 由(4-5-7)～(4-5-10)式求 $\widetilde{V}^*_{\cdot ij}$，$\widetilde{e}^*_{\cdot ij}$，再求 $\widetilde{V}^*_{\cdot ij}$，再求 $\widetilde{V}^*_{\times ij}$，$\widetilde{e}^*_{\times ij}$，这一步中一般地也要迭代.

对于纯格，方法与上述一样，不过材料只有一种.

三、输运计算

网格可分成三种：空格、纯格和混合格，如图 4-4-2 所示．每一个格边只能有一种输运格式．

(1) 连续输运，适于

① 无质点格之间；

② 无质点格和纯格之间；

③ 同种材料纯格之间；

④ 任意种格之间的动量输运．

连续输运计算方法如下

① 求质量和内能

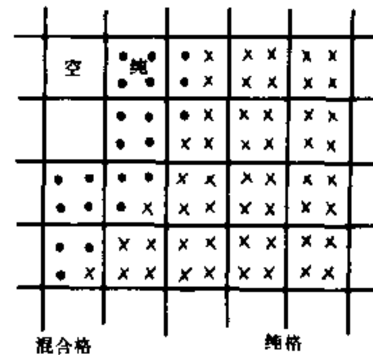


图 4-4-2 三种网格

$$M_{i,j}^{n+1}=M_{i,j}^{n}-\Delta M_{i+\frac{1}{2},j}-\Delta M_{i,j+\frac{1}{2}}+\Delta M_{i-\frac{1}{2},j}+\Delta M_{i,j-\frac{1}{2}} \quad (4\text{-}4\text{-}16)$$

式中

$$\Delta M_{i+\frac{1}{2},j}=\left[\frac{1}{2}\left(1+\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}\right)\rho_{i,j}+\frac{1}{2}\left(1-\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}\right)\rho_{i+1,j}\right]\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}\Delta y\Delta t$$

$$\Delta M_{i,j+\frac{1}{2}}=\left[\frac{1}{2}\left(1+\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}\right)\rho_{i,j}+\frac{1}{2}\left(1-\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}\right)\rho_{i,j+1}\right]\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}\Delta x\Delta t$$

$$\Delta M_{i-\frac{1}{2},j}=\left[\frac{1}{2}\left(1+\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}\right)\rho_{i-1,j}+\frac{1}{2}\left(1-\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}\right)\rho_{i,j}\right]\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}\Delta y\Delta t$$

$$\Delta M_{i,j-\frac{1}{2}}=\left[\frac{1}{2}\left(1+\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}\right)\rho_{i,j-1}+\frac{1}{2}\left(1-\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}\right)\rho_{i,j}\right]\tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}\Delta x\Delta t$$

$$e_{i,j}^{n+1}=\left(\frac{M^{n}\tilde{e}}{M^{n+1}}\right)_{i,j}+\left[-\Delta(Me)_{i+\frac{1}{2},j}+\Delta(Me)_{i-\frac{1}{2},j}-\Delta(Me)_{i,j+\frac{1}{2}}+\Delta(Me)_{i,j-\frac{1}{2}}\right]\frac{1}{M_{i,j}^{n+1}} \quad (4\text{-}4\text{-}17)$$

上式中右边的四项增量与质量增量算法一样．

② 求 $u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$，如图 4-4-3 所示，有

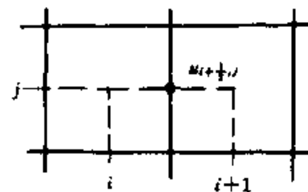


图 4-4-3 求 $u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$

$$(Mu)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}=(M^{n}\tilde{u})_{i+\frac{1}{2},j}-\Delta(Mu)_{i+1,j}-\Delta(Mu)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}+\Delta(Mu)_{i,j}+\Delta(Mu)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} \quad (4\text{-}4\text{-}18)$$

式中

$$\Delta(Mu)_{i+1,j}=\left[\frac{1}{2}\left(1+\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i+1,j}\right)\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}+\frac{1}{2}\left(1-\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i+1,j}\right)\tilde{u}_{i+\frac{3}{2},j}\right](\rho\tilde{u})_{i+1,j}\Delta y\Delta t$$

$$\Delta(Mu)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}=\left[\frac{1}{2}\left(1+\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\right)(\rho\tilde{u})_{i+\frac{1}{2},j}+\frac{1}{2}\left(1-\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\right)(\rho\tilde{u})_{i+\frac{1}{2},j+1}\right]\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\Delta x\Delta t$$

$$\Delta(Mu)_{i,j}=\left[\frac{1}{2}\left(1+\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i,j}\right)\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}+\frac{1}{2}\left(1-\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i,j}\right)\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}\right](\rho\tilde{u})_{i,j}\Delta y\Delta t$$

$$\Delta(Mu)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}=\left[\frac{1}{2}\left(1+\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}\right)(\rho\tilde{u})_{i+\frac{1}{2},j-1}\right.$$

$$+\frac{1}{2}(1-\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}})(\rho\tilde{u})_{i+\frac{1}{2},j}\Big]\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}\Delta x\Delta t$$

$$\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}+\tilde{v}_{i+1,j+\frac{1}{2}})$$

$$\tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(\tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}+\tilde{v}_{i-1,j-\frac{1}{2}})$$

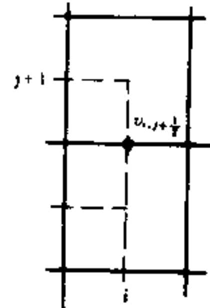


图 4-4-4　求 $v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}$

F 所以由(4-5-18)式就可求得 $u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$.

③ 求 $v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}$，如图 4-4-4 所示，有

$$(Mv)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}=(M^n\tilde{v})_{i,j+\frac{1}{2}}-\Delta(Mv)_{i,j+1}-\Delta(Mv)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$$
$$+\Delta(Mv)_{i,j}+\Delta(Mv)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \tag{4-4-19}$$

式中

$$\Delta(Mv)_{i,j+1}=\Big[\frac{1}{2}(1+\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i,j+1})\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}$$
$$+\frac{1}{2}(1-\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i,j+1})\tilde{v}_{i,j+\frac{3}{2}}\Big](\rho\tilde{v})_{i,j+1}\Delta x\Delta t$$

$$\Delta(Mv)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}=\Big[\frac{1}{2}(1+\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}})(\rho\tilde{v})_{i,j+\frac{1}{2}}$$
$$+\frac{1}{2}(1-\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}})(\rho\tilde{v})_{i+1,j+\frac{1}{2}}\Big]\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\Delta y\Delta t$$

$$\Delta(Mv)_{i,j}=\Big[\frac{1}{2}(1+\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i,j})\tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}(1-\mathrm{sgn}\tilde{v}_{i,j})\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}\Big](\rho\tilde{v})_{i,j}\Delta x\Delta t$$

$$\Delta(Mv)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}=\Big[\frac{1}{2}(1+\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}})(\rho\tilde{v})_{i-1,j+\frac{1}{2}}$$
$$+\frac{1}{2}(1-\mathrm{sgn}\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}})(\rho\tilde{v})_{i,j+\frac{1}{2}}\Big]\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}\Delta y\Delta t$$

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}+\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j+1})$$

$$\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}+\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j+1})$$

所以由(4-4-19)式就可求得 $v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}$

④ 求 ρ_{ij}^{n+1} 和 P_{ij}^{n+1}

$$\rho_{ij}^{n+1}=\frac{M_{ij}^{n+1}}{\Delta x\Delta y} \tag{4-4-20}$$

$$P_{ij}^{n+1}=f(\rho_{ij}^{n+1},e_{ij}^{n+1}). \tag{4-4-21}$$

(2) 离散输运，适于不同材料纯格之间以及混合格与任意种网格之间的输运.

① 设格子中有・材料标记点 θ 个，质量为 M_{ij}^n 每个标记点的质量记为 $(m_{\cdot k})_{ij}^n$. $(1\leqslant k\leqslant\theta)$ 所以

$$(m_{\cdot k})_{ij}^n=\left(\frac{M^n}{\theta}\right)_{ij} \tag{4-4-22}$$

显然，标记点的质量不但随(i,j)而变，而且也随时间 t 而变，而 PIC 方法中质点的质量是不随时间变化的.

② 计算 $m_{\cdot k}$ $n+1$ 时刻的坐标，方法同MAC. 如图4-4-5所示. 首先确定与点邻近的参与加权平均的四个速度值；其次确定加权面积，以最邻近的四个速度定义点的中心点引出的网格线，将以标记点为中心的四边形面积 $\Delta x\Delta y$ 划分为四份.

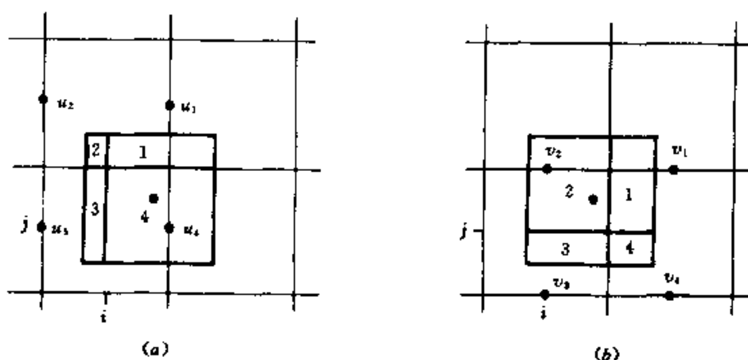


图 4-4-5 速度值与加权面积的确定

a. u 及加权面积； b. v 及加权面积

③ 如果标记点离开了原格，则带走了相应的质量和能量.

④ 同一个格子的四边可能出现两种输运方式，如图4-4-6所示，对于格子 A，左、下边为连续输运，右、上边为标记输运；对于格子 B，都是连续输运.

⑤ 有的带标记点的纯格，只有连续输运（如 B 格），计算出标记点的坐标，如果离开原格，不起输运效应.

⑥ 混合格的邻格必须有标记点，若没有，则应补上，如上图中格子 D，开始为空格，而当右邻格为混合格时，应有标记点. 另外，在计算过程中，可以根据网格中标记点的数量增减标记点数.

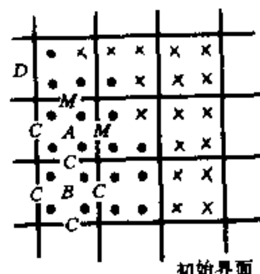


图 4-4-6 网格的两种输运方式

M：标记输运 C：连续输运

4.4.4 带示踪点的欧拉型流体弹塑性程序

一、概述

为了解决混合网格的连续输运问题，美国C. L. Mader 等提出了2DE(1972)方法[6]，不考虑混合网格中两种材料的具体界面位置，按一定规则计算混合网格两种材料的连续输运. 徐国荣等提出的多物质可压缩流体数值计算方法(1980)[7]，原理与2DE类似. 恽寿榕、涂侯杰* 等在此基础上，在于志鲁的帮助下，编制了带示踪点的欧拉型流体弹塑性程序MHEP (Marker Hydrodynamic Elastic Plastic)，采用二维流体弹塑性模型，“和”分裂离散格式，混合网格用连续输运，有无质量示踪点(Marker)，可以显示界面和材料流动历史，能够考虑材料的断裂和熔化. 为了考核程序，将MHEP程序退化为一维程序，和解析解结果作了对比，两者符合得较好，用MHEP程序计算射流侵彻问题和实验结果作了对比，符合得较好.

二、控制方程组

* 参加此项工作的还有彭金华，李相锋和张华.

采用的符号如下：

r,z,θ 柱坐标；

$\alpha=\begin{cases}0 & \text{平面对称，}\\ 1 & \text{轴对称，}\end{cases}$

σ_{rr}，σ_{zz}，$\sigma_{\theta\theta}$，σ_{rz} 应力张量分量；

ε_{rr}，ε_{zz}，$\varepsilon_{\theta\theta}$，$\varepsilon_{rz}$ 应变张量分量

S_{rr}，S_{zz}，$S_{\theta\theta}$，S_{rz} 偏应力张量分量

$u(u_r, u_z)$ 质点速度

q_{rr}，q_{zz}，$q_{\theta\theta}$，q_{rz} 真实粘性张量分量

q_r，q_z，q_θ 人工粘性

P 压力

ρ 密度

e 比内能

V 网格体积

μ 剪切强度

Y. 单向拉伸屈服强度

c 音速

M_{ij} 网格质量

(1) 守恒方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+u_r\frac{\partial\rho}{\partial r}+u_z\frac{\partial\rho}{\partial z}=-\rho\left(\frac{\partial(r^\alpha u_r)}{r^\alpha\partial r}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \tag{4-4-23}$$

$$\rho\left(\frac{\partial u_r}{\partial t}+u_r\frac{\partial u_r}{\partial r}+u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}\right)=\frac{\partial\sigma_{rr}}{\partial r}+\frac{\partial\sigma_{rz}}{\partial z}+\alpha\frac{\sigma_{rr}-\sigma_{\theta\theta}}{r} \tag{4-4-24}$$

$$\rho\left(\frac{\partial u_z}{\partial t}+u_r\frac{\partial u_z}{\partial r}+u_z\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)=\frac{\partial\sigma_{rz}}{\partial r}+\frac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z}+\alpha\frac{\sigma_{rz}}{r} \tag{4-4-25}$$

式中

$$\sigma_{rr}=S_{rr}+q_{rr}-(P+q_r)$$
$$\sigma_{zz}=S_{zz}+q_{zz}-(P+q_z)$$
$$\sigma_{\theta\theta}=S_{\theta\theta}+q_{\theta\theta}-(P+q_\theta)$$
$$\sigma_{rz}=S_{rz}+q_{rz}$$

$$\rho\left(\frac{\partial e}{\partial t}+u_r\frac{\partial e}{\partial r}+u_z\frac{\partial e}{\partial z}\right)=-(P+q)\left(\frac{\partial(r^\alpha u_r)}{r^\alpha\partial r}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)+(S_{rr}+q_{rr})\dot{\varepsilon}_{rr}+(S_{zz}+q_{zz})\dot{\varepsilon}_{zz}$$
$$+(S_{\theta\theta}+q_{\theta\theta})\dot{\varepsilon}_{\theta\theta}+2(S_{rz}+q_{rz})\dot{\varepsilon}_{rz} \tag{4-4-26}$$

式是 $\alpha=0$ 为平面对称，$\alpha=1$ 为轴对称情况.

(2) 真实粘性

$$q_{rr}=2\mu_v\left(\frac{\partial u_r}{\partial r}-\frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right)$$

$$q_{zz}=2\mu_v\left(\frac{\partial u_z}{\partial z}-\frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right)$$

$$q_{\theta\theta} = 2\mu_v\left(\alpha\frac{u_r}{r} - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right)$$

$$q_{rz} = \mu_v\left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z}\right)$$

式中 μ_v 为粘性系数，$\frac{\dot{V}}{V} = \frac{1}{r^a}\frac{\partial}{\partial r}(r^a u_r) + \frac{\partial u_z}{\partial z}$.

(3) 变形几何关系

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{rr} &= \frac{\partial u_r}{\partial r} \\ \dot{\varepsilon}_{zz} &= \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \dot{\varepsilon}_{\theta\theta} &= \frac{u_r}{r} \\ \dot{\varepsilon}_{rz} &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z}\right) \end{aligned} \tag{4-4-28}$$

(4) 应力应变关系

$$\begin{aligned} \dot{S}_{rr} &= 2\mu\left(\dot{\varepsilon}_{rr} - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) + \dot{\delta}_{rr} \\ \dot{S}_{zz} &= 2\mu\left(\dot{\varepsilon}_{zz} - \frac{1}{4}\frac{\dot{V}}{V}\right) + \dot{\delta}_{zz} \\ \dot{S}_{\theta\theta} &= 2\mu\left(\dot{\varepsilon}_{\theta\theta} - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) \\ \dot{S}_{rz} &= 2\mu\dot{\varepsilon}_{rz} + \dot{\delta}_{rz} \end{aligned} \tag{4-4-29}$$

式中 μ 为剪切模量，$\dot{\delta}_{ij}$ 为旋转修正量

$$\begin{aligned} \delta_{rr} &= \frac{S_{rr} - S_{zz}}{2}(\cos 2\omega - 1) + S_{rz}\sin 2\omega \\ \delta_{zz} &= -\delta_{rr} \\ \delta_{rz} &= S_{rz}(\cos 2\omega - 1) - \frac{1}{2}(S_{rr} - S_{zz})\sin 2\omega \\ \sin\omega &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial r}\right)\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{4-4-30}$$

(5) Von-Mises 屈服准则

$$\begin{aligned} F &= Y_0\left[3\left(S_{rr}^2 + S_{rz}^2 + S_{zz}^2 + S_{rr}S_{zz}\right)\right]^{-\frac{1}{2}} \\ S_{ij} &= \begin{cases} S_{ij} & F \geqslant 1 \\ FS_{ij} & F < 1 \end{cases} \end{aligned} \tag{4-4-31}$$

(6) 状态方程

根据不同的算题，采用不同的状态方程，下面介绍两种.

① 稠密气体状态方程

$$\begin{aligned} P &= a\left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1\right) + b\frac{\rho}{\rho_0}e \\ a &= c_0^2\rho_0 \end{aligned} \tag{4-4-32}$$

$$b = (\gamma - 1)\rho_0$$

式中 c_0 和 ρ_0 分别是初始声速和初始密度，γ 是材料常数.

②多项式形式的 Mie-Grüneisen 状态方程[9]

$$P = A + Be + C\mu_1 + D\mu_1^2 + E\mu_1^3 + F\mu_1^4 + G\mu_1^5 + H\mu_1^6 \tag{4-4-33}$$

$$\mu_1 = \frac{\rho}{\rho_0} - 1$$

$$A = -\Gamma_0\rho_0 e_0$$

$$B = \Gamma_0\rho_0$$

$$C = \rho_0 c_a^2$$

$$D = \frac{1}{2}\rho_0 c_a^2[2 - \Gamma_0 + 4(\lambda - 1)]$$

$$E = \rho_0 c_a^2[3(\lambda - 1)^2 - (2 - \Gamma_0)(\lambda - 1)]$$

$$F = \frac{1}{2}\rho_0 c_a^2[8(\lambda - 1)^3 + 3(2 - \Gamma_0)(\lambda - 1)^2]$$

$$G = \rho_0 c_a^2[5(\lambda - 1)^4 + 2(2 - \Gamma_0)(\lambda - 1)^3]$$

$$H = \frac{5}{2}\rho_0 c_a^2(2 - \Gamma_0)(\lambda - 1)^4$$

式中 Γ_0 为 Grüneisen 系数，c_a 和 λ 为冲击波速度 u_s 和粒子速度 u_p 线性关系中的系数：

$$u_s = c_a + \lambda u_p$$

(7) 人工粘性

$$q_r = a'\rho(|\Delta u_r| - \Delta u_r)^2 \tag{4-4-34}$$

$$q_z = a'\rho(|\Delta u_z| - \Delta u_z)^2$$

式中 a' 为系数

(8) 熔化条件

当网格中比内能 e 超过某一值 e_m 时，则该网格材料熔化，此时取 $Y_0=0$

(9) 断裂条件

当　　$P\leqslant P_s$，$\rho\leqslant\rho_s$

取　　　$P=0$

其中 P_s 为断裂压力，ρ_s 为断裂密度.

(10) 示踪点

在网格内或在界面设置无质量示踪点(Marker)，跟踪流场和界面运动，第 m 个示踪点的速度分量为(在 n 时刻) u_m^n、v_m^n，空间坐标 r^n、z^n，则 $n+1$ 时刻坐标为

$$r^{n+1} = r^n + u_m^n\Delta t$$

$$z^{n+1} = z^n + v_m^n\Delta t \tag{4-4-35}$$

三、离散方案

差分计算用"和"分裂格式，分两步计算，分两步计算. 第一步是拉格朗日计算，第二步是输运计算，最后进行示踪点坐标计算. 对于时间用向前差分，对于空间用中心差分，得到的是一阶精度显式格式. 网格及变量设置见图 4-4-7，计算域用两族直线

$$z = i\Delta z \qquad i = 1,2,\cdots i_m$$

$$r = j\Delta r \qquad j = 1,2,\cdots j_m$$

覆盖，四周边界加一排虚网格. 网格尺寸 Δz 和 Δr 可以是不等长的. 网格 ij 的上面积为

$$S_{r_j} = (2\pi j\Delta r)^a \Delta z \tag{4-4-36}$$

侧面积为

$$S_{z_j} = \left[2\pi\left(j - \frac{1}{2}\right)\Delta r\right]^a \Delta r \tag{4-4-37}$$

体积为

$$V_j = \left[2\pi\left(j - \frac{1}{2}\right)\Delta r\right]^a \Delta r\Delta z \tag{4-4-38}$$

除人工粘性定义在格边外，其余力学量均定义在格心.

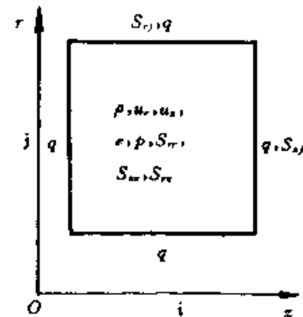


图 4-4-7 EMHE 法变量配置

混合格中允许有两种材料，以材料号 θ 为 1 和 2 表示.

为了处理自由界面网格，引入体积比 σ

$$\sigma = \frac{V_{ij}^n}{V_j^\circ} \tag{4-4-39}$$

式中 V_j° 为初始网格体积. σ 小于 1 为自由边界格，计算时作专门处理，σ 等于 1 为内格和非自由边界格，不作专门处理.

四、t^n 时刻一些物理量的确定

已知 t^n 时刻 ij 网格的 M、σ、e、u_r、u_z 等量；求其它物理量.

(1) 求 P_{ij}^n 和 ρ_{ij}^n

对于纯格

$$\rho_{\theta ij}^n = \frac{M_{\theta ij}^n}{\sigma_{\theta ij}^n V_j} \tag{4-4-40}$$

$$P_{\theta ij}^n = P(\rho, e)_{\theta ij}^n \tag{4-4-41}$$

对于混合格，用上式分别求两种材料的 P 和 ρ，由

$$P_{1ij}^n = P_{2ij}^n$$

$$\sigma_{1ij}^n + \sigma_{2ij}^n = 1$$

即可解出各量，但是要用迭代求解，采用梁德寿提出的部分体积加权法

$$P_{ij}^n = (\sigma_1 P_1 + \sigma_2 P_2)_{ij}^n \tag{4-4-42}$$

可以直接求解.

(2) 熔化条件和强度

合 $e_{\theta m}$ 为 θ 材料熔化比内能，当 $e_{\theta ij}^n$ 大于 $e_{\theta m}$ 时，材料熔化，其强度 $Y_{\theta ij}^n$ 为零，否则按线性下降

$$Y_{\theta ij}^n = \begin{cases} Y_\theta^{\circ n}\left(1 - \dfrac{e_{\theta ij}^n}{e_{\theta m}}\right) & e_{\theta ij}^n < e_{\theta m} \\ 0 & e_{\theta ij}^n \geqslant e_{\theta m} \end{cases} \tag{4-4-43}$$

(3) 静水压

由状态方程求得的压力，要作如下修正以扣除塑性变形部分的效应，因为状态方程是由实验定的各系数，包含了弹塑性变表，而静水压仅考虑体积变形.

$$P_{\theta ij}^n = P_{\theta ij}^n\left(1 - \frac{2Y_{\theta ij}^n}{3\mathrm{PLA}P_\theta}\right) \tag{4-4-44}$$

式中 $PLAP_\theta$ 为 θ 材料的静水压修正系数. 对于混合格,取

$$Y_{ij}^n = \min(Y_{1ij}^n, Y_{2ij}^n)$$

(4) 破坏准则

$$P_{\theta_{ij}}^n = \begin{cases} P_{\theta_{ij}}^n & P_{\theta_{ij}}^n > P_{\theta s},\ \rho_{\theta_{ij}} > \rho_{\theta s} \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \tag{4-4-45}$$

式中 $P_{\theta s}$ 和 $\rho_{\theta s}$ 为 θ 材料断裂临界值.

(5) 粘性

真实粘性:

$$q_{rr\,ij}^n = 2\mu_v\left[\frac{(u_{rj+\frac{1}{2}} - u_{rj-\frac{1}{2}})_i^n}{\Delta r} - \frac{1}{3}\left(\frac{\dot V}{V}\right)_{ij}^n\right]$$

$$q_{zz\,ij}^n = 2\mu_v\left[\frac{(u_{zi+\frac{1}{2}} - u_{zi-\frac{1}{2}})_j^n}{\Delta z} - \frac{1}{3}\left(\frac{\dot V}{V}\right)_{ij}^n\right] \tag{4-4-46}$$

$$q_{rz\,ij}^n = \mu_v\left[\frac{(u_{zj+\frac{1}{2}} - u_{zj-\frac{1}{2}})_i^n}{\Delta r} + \frac{(u_{ri+\frac{1}{2}} - u_{ri-\frac{1}{2}})_j^n}{\Delta z}\right]$$

其中 $\left(\frac{\dot V}{V}\right)_{ij}^n = \frac{(r^\alpha u_{ri}^n)_{j+\frac{1}{2}} - (r^\alpha u_{ri}^n)_{j-\frac{1}{2}}}{r_j^\alpha \Delta r} + \frac{(u_{zi+\frac{1}{2}} - u_{zi-\frac{1}{2}})_j^n}{\Delta z}$

μ_v 为流体粘性系数.

人工粘性:

$$q_{ri,j+\frac{1}{2}}^n = a'\rho_{ij}^n\left[\,|u_{rj+1} - u_{rj}|_i^n - (u_{rj+1} - u_{rj})_i^n\right]^2$$

$$q_{zi+\frac{1}{2},j} = a'\rho_{ij}^n\left[\,|u_{zi+1} - u_{zi}|_j^n - (u_{zi+1} - u_{zi})_j^n\right]^2 \tag{4-4-47}$$

五、应力偏量

采用关系

$$\Sigma S_{xx} = 0 \qquad xx = rr, zz, \theta\theta$$
$$\Sigma q_{xx} = 0 \tag{4-4-48}$$

可以消去 $\theta\theta$ 分量,由(4-4-29)式

$$\begin{bmatrix}\tilde S_{rr}\\ \tilde S_{zz}\end{bmatrix}_{ij} = \begin{bmatrix}S_{rr}\\ S_{zz}\end{bmatrix}_{ij}^n + \Delta t\mu\begin{bmatrix}\eta_{rr}\\ \eta_{zz}\end{bmatrix}_{ij}^n + \begin{bmatrix}\Delta t\\ -\Delta t\end{bmatrix}2(\omega S_{rz})_{ij}^n$$

$$\tilde S_{rzij} = S_{rzij}^n + \Delta t\left[\mu\eta_{rz} - \omega(S_{rr} - S_{zz})\right]_{ij}^n \tag{4-4-49}$$

其中

$$\eta_{rrij}^n = 2\left[\frac{(u_{rj+\frac{1}{2}} - u_{rj-\frac{1}{2}})_i^n}{\Delta r} - \frac{1}{3}\left(\frac{\dot V}{V}\right)_{ij}^n\right]$$

$$\eta_{zzij}^n = 2\left[\frac{(u_{zi+\frac{1}{2}} - u_{zi-\frac{1}{2}})_j^n}{\Delta z} - \frac{1}{3}\left(\frac{\dot V}{V}\right)_{ij}^n\right]$$

$$\eta_{rzij}^n = \frac{(u_{zj+\frac{1}{2}} - u_{zj-\frac{1}{2}})_i^n}{\Delta r} + \frac{(u_{ri+\frac{1}{2}} - u_{ri-\frac{1}{2}})_j^n}{\Delta z}$$

$$\omega_{ij}^n = \frac{1}{2}\left[\frac{(u_{ri+\frac{1}{2}} - u_{ri-\frac{1}{2}})_j^n}{\Delta z} - \frac{(u_{zj+\frac{1}{2}} - u_{zj-\frac{1}{2}})_i^n}{\Delta r}\right]$$

以上得到的是 t^n 时刻的格心值,而 t^{n+1} 时刻的格心点在 t^n 时刻位于 P^n 点,与格心的位移为

$$\text{径向}: D_r = -u_{rij}^n \Delta t$$
$$\text{轴向}: D_z = -u_{zij}^n \Delta t \tag{4-4-50}$$

p^n 点的 $\bar{S}_p$ 值就是 S^{n+1} 值，而 $\bar{S}_p$ 值用 PIC 中面积加权的方法，由靠得最近的四个网格的 $\bar{S}$ 值加权平均得到.

由(4-4-31)式求 F_{ij}^{n+1}

$$F_{ij}^{n+1} = Y_{ij}^{n+1}[3(S_{rr}{}^2 + S_{rz}{}^2 + S_{zz}{}^2 + S_{rr}S_{zz})_{ij}^{n+1}]^{-\frac{1}{2}}$$
$$S_{xxij}^{n+1} = \begin{cases} F_{ij}^{n+1} \cdot S_{xxij}^{n+1} & \text{当 } F_{ij}^{n+1} < 1 \\ S_{xxij}^{n+1} & F_{ij}^{n+1} \geqslant 1 \end{cases} \tag{4-4-51}$$

式中脚标 xx 表示 rr，zz 和 rz.

六、守恒方程的拉格朗日计算步

(1) 速度计算

由(4-4-24)和(4-4-25)式去掉输运项，再按 r 方向和 z 方向两步计算，得

$$\tilde{\tilde{u}} = u_{rij}^n + \frac{\Delta t}{\rho_{ij}^n}\left\{\left[\frac{r_{j+\frac{1}{2}}^a(S_{rr}^{n+1} + q_{rr}{}^n - P^n)_{i,j+\frac{1}{2}}}{r_j^a \Delta r} - \frac{r_{j-\frac{1}{2}}^a(S_{rr}{}^{n+1} + q_{rr}{}^n - P^n)_{ij-\frac{1}{2}}}{r_j^a \Delta r}\right]\right.$$
$$\left. - \frac{(q_{rj+\frac{1}{2}} - q_{rj-\frac{1}{2}})_i^n}{\Delta r} + \alpha\frac{(S_{rr}{}^{n+1} + q_{rr}^n + S_{zz}{}^{n+1} + q_{zz}^n + P^n)_{ij}}{r_j}\right\} \tag{4-4-52}$$

$$\tilde{u}_{rij} = \tilde{\tilde{u}}_{rij} + \frac{\Delta t}{\rho_{ij}^n}\left[\frac{(S_{rz}{}^{n+1} + q_{rz})_{i+\frac{1}{2},j} - (S_{rz}{}^{n+1} + q_{rz})_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta z}\right] \tag{4-4-53}$$

$$\tilde{\tilde{u}}_{zij} = u_{zij}^n + \frac{\Delta t}{\rho_{ij}^n}\left[\frac{r_{j+\frac{1}{2}}^a(S_{rz}{}^{n+1} + q_{rz}{}^n)_{i,j+\frac{1}{2}}}{r_j^a \Delta r} - \frac{r_{j-\frac{1}{2}}^a(S_{rz}^{n+1} + q_{rz}{}^n)_{i,j-\frac{1}{2}}}{r_j^a \Delta r}\right] \tag{4-4-54}$$

$$\tilde{u}_{zij} = \tilde{\tilde{u}}_{zij} + \frac{\Delta t}{\rho_{ij}^n}\left[\frac{(S_{zz}^{n+1} + q_{zz}^n - P^n - q_z^n)_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta z} - \frac{(S_{zz}^{n+1} + q_{zz}^n - P^n - q_z^n)_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta z}\right] \tag{4-4-55}$$

其中格边值均取相邻格心值的算术平均值.

(2) 比内能计算

r 方向比内能增量 $\Delta\tilde{e}_r$

$$\Delta\tilde{e}_r = \frac{\Delta t}{\rho_{ij}^n}\left\{-\frac{r_{j+\frac{1}{2}}^a \bar{u}_{ri,j+\frac{1}{2}}(P_j + q_{rj+\frac{1}{2}})_i^n}{r_j^a \Delta r} + \frac{r_{j-\frac{1}{2}}^a \bar{u}_{ri,j-\frac{1}{2}}(P_j + q_{rj-\frac{1}{2}})_i^n}{r_j^a \Delta r}\right.$$
$$\left. + \frac{\bar{u}_{rij}(q_{rj+\frac{1}{2}} - q_{rj-\frac{1}{2}})_i^n}{\Delta r} + (S_{rr}^{n+1} + q_{rr}^n)_{ij}\left[\frac{\bar{u}_{ri,j+\frac{1}{2}} - \bar{u}_{ri,j-\frac{1}{2}}}{\Delta r} - \frac{\alpha\bar{u}_{rij}}{r_j}\right]\right\} \tag{4-4-56}$$

z 方向比内能增量 $\Delta\tilde{e}_z$

$$\Delta\tilde{e}_z = \frac{\Delta t}{\rho_{ij}^n}\left[-\frac{\bar{u}_{zi+\frac{1}{2},j}(P_{ij}^n + q_{zi+\frac{1}{2},j}^n) - \bar{u}_{zi-\frac{1}{2},j}(P_{ij}^n + q_{zi-\frac{1}{2},j}^n)}{\Delta z} + \bar{u}_{zij}\frac{(q_{zi+\frac{1}{2}} - q_{zi-\frac{1}{2}})_j^n}{\Delta z}\right.$$
$$\left. + (S_{zz}^{n+1} + q_{zz}^n)_{ij}\frac{\bar{u}_{zi+\frac{1}{2},j} - \bar{u}_{zi-\frac{1}{2},j}}{\Delta z} + (S_{rz}^{n+1} + q_{rz}^n)_{ij}\frac{\bar{u}_{ri+\frac{1}{2},j} - \bar{u}_{ri-\frac{1}{2},j}}{\Delta z}\right] \tag{4-4-57}$$

式中 $\bar{u}_{rij} = \dfrac{1}{2}(\tilde{u}_r + u_r^n)_{ij}$，余类推.

对于纯格

$$\tilde{e}_{ij} = (e^n + \Delta\tilde{e}_r + \Delta\tilde{e}_z)_{ij} \tag{4-4-58}$$

对于混合格，比内能增量按体份额分配

$$\tilde{e}_{\theta ij} = \left[e_\theta^n + (\Delta\tilde{e}_r + \Delta\tilde{e}_z)\frac{\sigma_\theta^{\ n}}{\sigma_1^{\ n} + \sigma_2^{\ n}}\right]_{ij} \tag{4-4-59}$$

七、守恒方程的输运计算步

方法同 FLIC 法的输运计算，不同的是有关混合网格的计算.

采用贡献网格法，以 i 网格的右侧面 S_z 的输运进行讨论，并设 i 格为贡献网格(DC)，$i+1$ 网格为接受网格(AC)，下面分几种情况讨论. 通过 S_z 面的质量输运为

$$\Delta m_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{\theta=1}^{2}(\rho_\theta^n \beta_\theta^n u_z)_{i+\frac{1}{2}} S_z \Delta t \tag{4-4-60}$$

式中 β_θ是 θ 物质的输运面积份额.

① DC 是 θ 物质纯格，则不论 AC 是那种类型网格，均取 DC 中的密度，并且 $\beta_\theta=1$；

② DC 是混合格，AC 是纯格，见图 4-4-8.

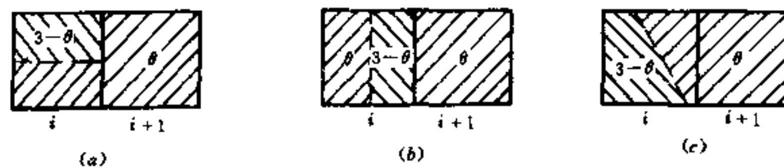


图 4-4-8　DC 是混合格，AC 是纯格的情况

根据连续性原则图中 c 是最可能的，即先输运 θ 物质，不够时以 $3-\theta$ 物质补充；

③ DC 和 AC 均为混合格，见图 4-4-9，根据连续性原则，最可能的是 c 情况，b 情况较少，

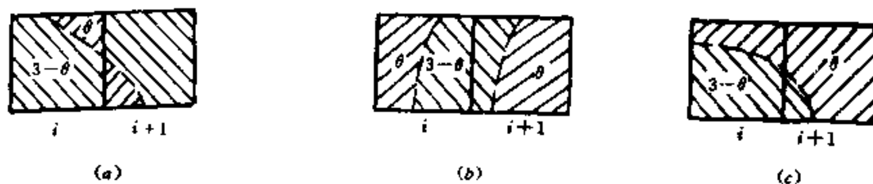


图 4-4-9　DC 和 AC 均为混合格情况

不予考虑，取 β_θ^n 为

$$\beta_\theta^n = \frac{1}{2}\left[(\sigma_\theta^n)_{DC} + (\sigma_\theta^n)_{AC}\right] \tag{4-4-61}$$

θ 物质输运量

$$\Delta m_{\theta i+\frac{1}{2}} = (\rho_\theta^n \beta_\theta^n u_z)_{i+\frac{1}{2}} S_z \Delta t \tag{4-4-62}$$

DC 格中 θ 物质的质量为 $M_{\theta DC}^n$，两者相差 $\Delta\theta$，即

$$\Delta\theta = M_{\theta DC}^n - \Delta M_{\theta i+\frac{1}{2}}$$

若 $\Delta\theta<0$，说明 DC 中 θ 物质不够，不足部分改输运 $3-\theta$ 物质，考虑这种情况的输运公式为

$$\Delta m^n_{\theta i+\frac{1}{2}} = \min\left[M^n_{\theta DC},\ \Delta m_{\theta i+\frac{1}{2}} + \alpha_{3-\theta}\left|\Delta(3-\theta)\right|\left(\frac{\rho_\theta}{\rho_{3-\theta}}\right)^n_{DC}\right] \tag{4-4-63}$$

式中

$$\alpha_{3-\theta} = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \quad 当\ \Delta(3-\theta)\begin{cases} < 0 \\ \geqslant 0 \end{cases}$$

在(4-4-62)式中，$u_{n+\frac{1}{2}}$由下式求得

$$u_{zi+\frac{1}{2}} = \frac{\tilde{u}_{zi} + \tilde{u}_{zi+1}}{2\left[1 + \delta\dfrac{(\tilde{u}_{zi+1} - \tilde{u}_{zi})\Delta t}{\Delta z}\right]} \tag{4-4-64}$$

式中 $\delta=0$ 是算术平均值，$\delta=1$ 是线性插值，同(4-3-19)式，$\delta=0.5$ 是介于前两者之中间值，常取 $\delta=0.5$.

用类似的方法计算上面积 $S_{r,j}$的输运质量，则

$$M^{n+1}_{\theta i,j} = M^n_{\theta i,j} - \Delta m_{\theta,i+\frac{1}{2},j} - \Delta m_{\theta i,j+\frac{1}{2}} + \Delta m_{\theta i-\frac{1}{2},j} + \Delta m_{\theta i,j-\frac{1}{2}} \tag{4-4-65}$$

$$\theta = 1,2$$

$$M^{n+1}_{i,j} = (M_1 + M_2)^{n+1}_{i,j} \tag{4-4-66}$$

r 方向动量 X

$$X^{n+1}_{\theta i,j} = (M^n_\theta\tilde{u}_r)_{i,j} - (\tilde{u}_r\Delta m_\theta)_{i+\frac{1}{2},j} - (\tilde{u}_r\Delta m_\theta)_{i,j+\frac{1}{2}} + (\tilde{u}_r\Delta m_\theta)_{i-\frac{1}{2},j} + (\tilde{u}_r\Delta m_\theta)_{i,j-\frac{1}{2}} \tag{4-4-67}$$

z 方向动量 Y

$$Y^{n+1}_{\theta i,j} = (M^n_\theta\tilde{u}_z)_{i,j} - (\tilde{u}_z\Delta m_\theta)_{i+\frac{1}{2},j} - (\tilde{u}_z\Delta m_\theta)_{i,j+\frac{1}{2}} + (\tilde{u}_z\Delta m_\theta)_{i-\frac{1}{2},j} + (\tilde{u}_z\Delta m_\theta)_{i,j-\frac{1}{2}}$$

t^{n+1}时刻速度

$$\begin{bmatrix} u_z \\ u_r \end{bmatrix}^{n+1}_{i,j} = \frac{1}{M^{n+1}_{i,j}}\begin{bmatrix} Y_1 + Y_2 \\ X_1 + X_2 \end{bmatrix}^{n+1}_{i,j} \tag{4-4-68}$$

能量输运由下式给出

$$(E_\theta M_\theta)^{n+1}_{i,j} = (E_\theta M_\theta)^n_{i,j} - (\tilde{E}_\theta\Delta m_\theta)_{i+\frac{1}{2},j} - (\tilde{E}_\theta\Delta m_\theta)_{i,j+\frac{1}{2}} + (\tilde{E}_\theta\Delta m_\theta)_{i-\frac{1}{2},j} + (\tilde{E}_\theta\Delta m_\theta)_{i,j-\frac{1}{2}} \tag{4-4-69}$$

式中 $E_\theta = e_\theta + \frac{1}{2}(u_r^2 + u_z^2)$

$$e^{n+1}_{\theta i,j} = \frac{1}{M^{n+1}_{\theta i,j}}\left[(E_\theta M_\theta)^{n+1}_{i,j} - \frac{1}{2}(u_r^2 + u_z^2)^{n+1}_{i,j}\right]$$

八、示踪点坐标

记示踪点速度为 (u_z^*, u_r^*)，用最邻近的四个格心速度值，用面积加权法求出 $(u_z^*, u_r^*)^{n+1}$，据此计算出经 Δt 后的新坐标.

九、稳定性条件

采用 CFL 条件

$$\Delta t \leqslant \alpha_0 \min\left[\frac{\Delta z}{(|u_z| + c)^{n+1}_{\max}},\ \frac{\Delta r}{(|u_r| + c)^{n+1}_{\max}}\right]$$

式中 c 为音速，角标 max 指所有网格中的 $|u_z| + c$ 的 $|u_r| + c$ 的最大值.

十、计算实例

MHEP 程序功能较全面，应用范围和 HELP 差不多，内界面处理不如 HELP 清晰，但是机时要省得多，MHEP 主要适用于爆炸场计算.

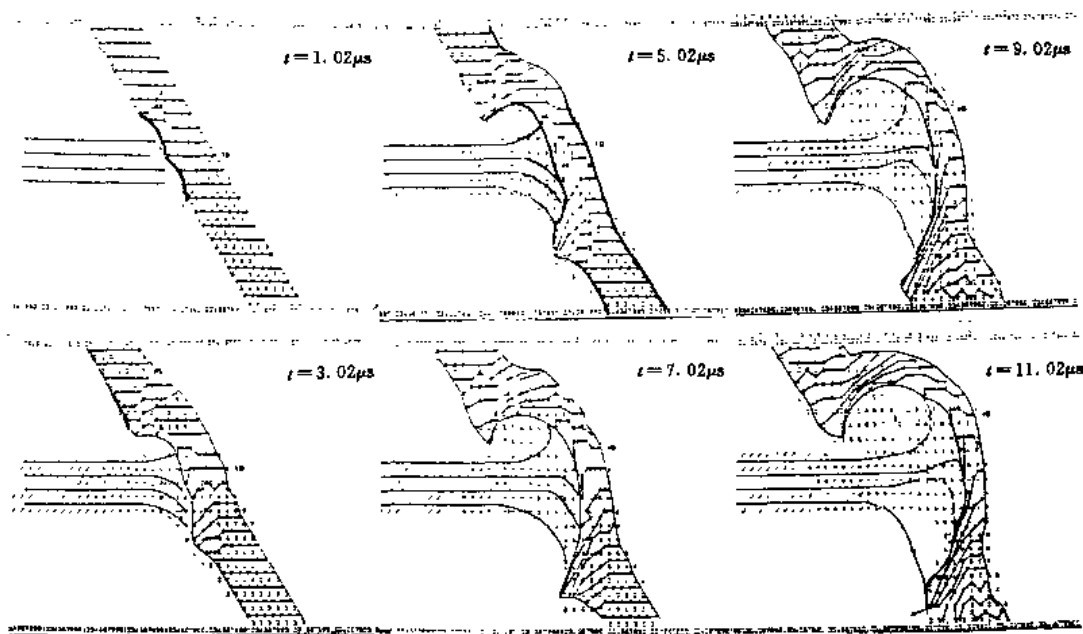


图 4-4-10 射流 45°斜侵彻计算图形

① 侵彻计算，用MHEP 程序进行了不同材料和不同着角的侵彻计算. 图 4-4-10 是 4mm 宽射流，速度为 2mm/μs，45°斜侵彻（平面问题）4.9mm 厚靶的情形，采用不同符号的无质量示踪点，显示变形情况，图 4-4-11 是 4mm 射流，速度为 2mm/μs，65°斜侵彻靶板，侵彻速度 u_z 随深度 Z 的变化曲线，图中(1)区相当开坑区，(2) 区相当准定常区，(3) 区中 u_z 迅速增加，相当于靶背面自由界面的影响区.

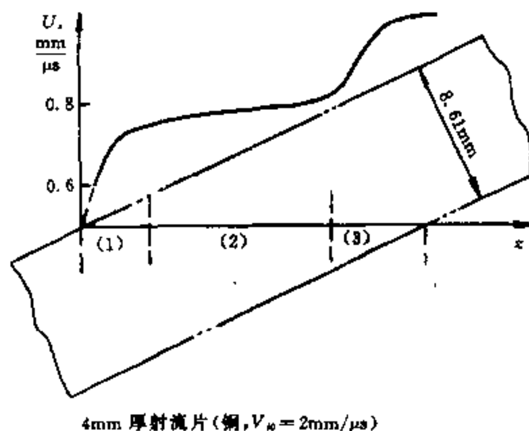


图 4-4-11 射流 65°斜侵彻 $u_z(Z)$ 计算曲线

② 有挡墙爆炸场计算，10 吨梯恩梯地面爆炸，数值计算了无挡墙和有挡墙条件下的爆炸场，用二维轴对称坐标，地面和挡墙作为刚性壁处理，图 4-4-12 为计算结果与经验公式的对比，图中 dP 为冲击波超压，R 为爆心距离与炸药量立方根之比，可见符合得较好. 图 4-4-13 是有挡墙情况不同时刻的压力场，图 4-4-14 是有挡墙情况离爆心不同对比距离 R 处的压力 P 变化曲线.

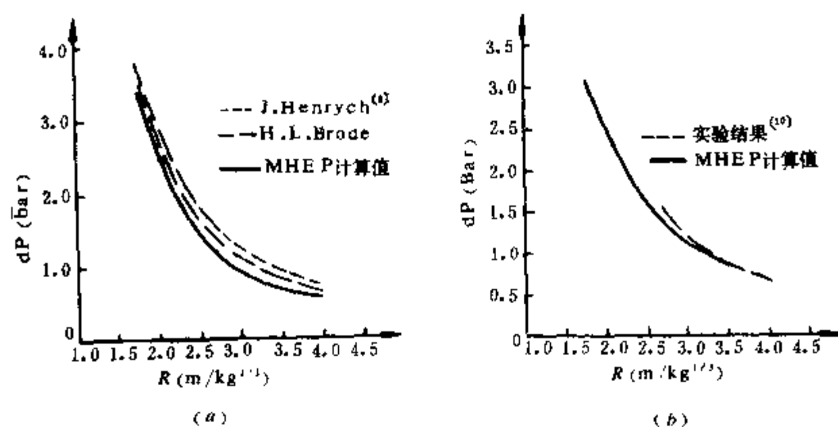


图 4-4-12　MHEP 程序爆炸场计算与经验公式对比

a. 无挡墙；　b. 有挡墙

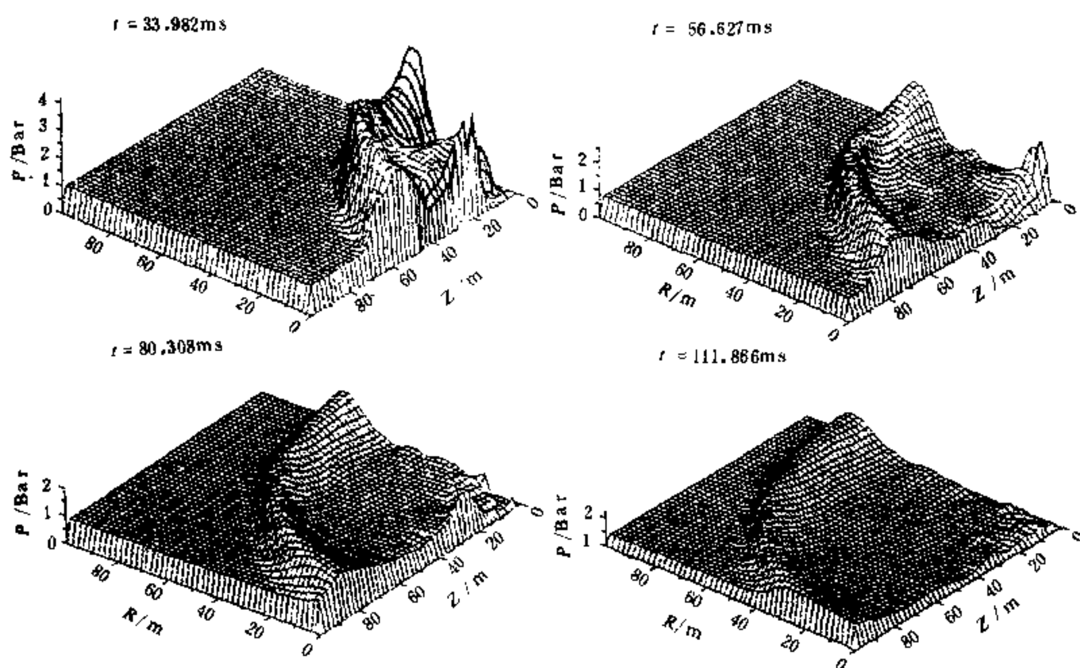


图 4-4-13　梯恩梯爆炸压力场

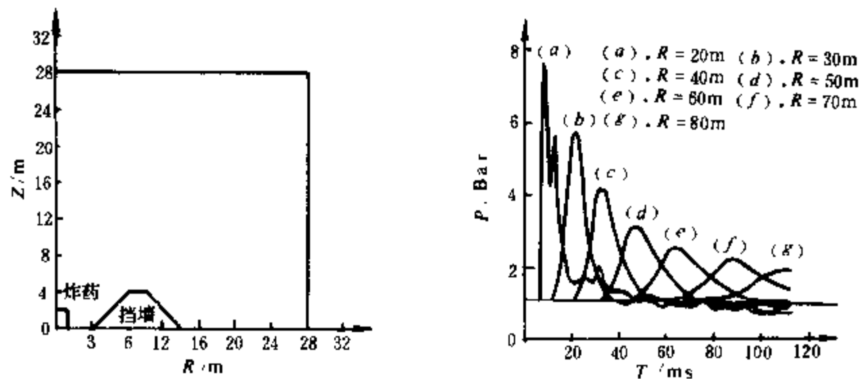


图 4-4-14 梯恩梯爆炸不同 R 处的压力变化曲线

§4.5 HELP 方法

HELP 程序由 L. T. Hageman 和 J. M. Walsh 于 1970 年提出[11]，是功能全面的大型欧拉程序，其特点是用无质量示踪点联成示踪线，用以细微地显示多物质界面，清晰程度优于 PIC 法和 2DE 法. 示踪线分割网格边，确定混合网格中各材料的输运面积，用连续输运方法计算输运步，示踪线允许与一个网格多次相交，可以计算大变形，又要求清晰显示界面的问题. 现结合射流垂侵彻靶板问题介绍*.

4.5.1 控制方程组

采用柱对称坐标系. 靶板有未知量 21 个：ρ_t 密度(或质量 m_t)；u_t,v_t 速度；P_t 压力；E_t 比能(或 I_t 内能)，T_t 温度；$\sigma_r,\sigma_z,\sigma_\theta$ 正应力；τ 切应力；S_r,S_z,S_θ 应力偏量；

$\dot\varepsilon_r^e,\dot\varepsilon_z^e,\dot\varepsilon_\theta^e$ 弹性应变率偏量；$\dot\gamma^e$ 弹性角应变率；$\dot\varepsilon_r^p,\dot\varepsilon_z^p,\dot\varepsilon_\theta^p$ 塑性应变率偏量，$\dot\gamma^p$ 塑性角应变率；Y 强度.

射流有未知量 6 个：$\rho_j,u_j,v_j,P_j,T_j,E_j$.

靶板有 22 个方程(脚标 t 未写出来)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho r=-\frac{\partial}{\partial r}\rho ur-\frac{\partial}{\partial z}\rho vr \tag{4-5-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho ur=-\frac{\partial}{\partial r}(Pr+\rho u^2r)-\frac{\partial}{\partial z}r\rho uv+\frac{\partial}{\partial r}rS_r+\frac{\partial}{\partial z}r\tau-\sigma_\theta \tag{4-5-2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho vr=-\frac{\partial}{\partial z}(Pr+\rho v^2r)-\frac{\partial}{\partial r}r\rho uv+\frac{\partial}{\partial z}rS_z+\frac{\partial}{\partial r}r\tau \tag{4-5-3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho Er=-\frac{\partial}{\partial r}(r\rho uE+ruP)-\frac{\partial}{\partial z}(r\rho vE+rvP)+\frac{\partial}{\partial r}(ru\sigma_r+rv\tau)+\frac{\partial}{\partial z}(ru\tau+rv\sigma_z) \tag{4-5-4}$$

* 主要参考了谢春生等提供的材料

应力偏量：$\sigma_r = S_r - P$ (4-5-5) $\sigma_z = S_z - P$ (4-5-6) $\sigma_\theta = S_\theta - P$ (4-5-7)

$$P = \frac{1}{3}(\sigma_r + \sigma_z + \sigma_\theta),\ S_r + S_z + S_\theta = 0$$

应变率：
$$\frac{\partial u}{\partial r} = \dot{\varepsilon}_r^e + \dot{\varepsilon}_r^P + \frac{1}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u}{r}\right) \tag{4-5-8}$$

$$\frac{\partial v}{\partial z} = \dot{\varepsilon}_z^e + \dot{\varepsilon}_z^P + \frac{1}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u}{r}\right) \tag{4-5-9}$$

$$\frac{u}{r} = \dot{\varepsilon}_\theta^e + \dot{\varepsilon}_\theta^P + \frac{1}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u}{r}\right) \tag{4-5-10}$$

$$\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} = 2\dot{\gamma}^e + 2\dot{\gamma}^P \tag{4-5-11}$$

广义虎克定律：
$$\dot{S}_r = 2G\dot{\varepsilon}_r^e + 2\tau\left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial r}\right) \tag{4-5-12}$$

$$\dot{S}_z = 2G\dot{\varepsilon}_z^e - 2\tau\left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial r}\right) \tag{4-5-13}$$

G：剪切模量
$$\dot{S}_\theta = 2G\dot{\varepsilon}_\theta^e \tag{4-5-14}$$

$$\dot{\tau} = 2G\dot{\gamma}^e - (S_r - S_z)\left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial r}\right) \tag{4-5-15}$$

上式中 G 为弹性剪切模量.

塑性增量关系：$\dot{\varepsilon}_r^P = \lambda S_r$ (4-5-16) $\dot{\varepsilon}_z^P = \lambda S_z$ (4-5-17)

$\dot{\varepsilon}_\theta^P = \lambda S_\theta$ (4-5-18) $\dot{\gamma}^P = \lambda\tau$ (4-5-19)

$$\lambda = \sqrt{\frac{3}{2}}\,\frac{1}{Y}(\dot{\varepsilon}_r^{P^2} + \dot{\varepsilon}_z^{P^2} + \dot{\varepsilon}_\theta^{P^2} + 2\dot{\gamma}^{P^2})^{\frac{1}{2}}$$

强度公式：由 Towle（托尔）经验公式

$$Y = Y_\circ(1 + \alpha P)\exp\left[\frac{-\beta T}{T_m(P)}\right]$$

由 Lindeman（林德曼）理论的 Simon（西蒙）公式

$$T_m(P) = (1 + \delta P)^n T_{mo}$$

两式合并得：
$$Y = Y_0(1 + \alpha P)\exp\left[\frac{-\beta T}{T_{mo}(1 + \delta P)^n}\right] \tag{4-5-20}$$

式中 Y_0 是常温常压下材料强度，T_{mo} 是材料常温常压下熔点，α、β、δ、n 是材料常数.

温度方程：
$$T = \left(T_0 + \frac{E_s}{C_v}\right)\exp\left(AP\ln\frac{\rho}{\rho_0}\right) \tag{4-5-21}$$

式中 T_0：常温（绝对温度），C_v：等容比热，ρ_0：常温密度，AP：系数，取 1.97.

$$E_s = \frac{1}{\rho_0}\left\{\left[\left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^2\frac{B - A}{AP + 1} + \left(I\rho_0 + \frac{A - 2B}{AP}\right)\frac{\rho_0}{\rho} + \frac{B}{AP - 1}\right]\exp\left[(AP - 1)\ln\frac{\rho_0}{\rho}\right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{A - B}{AP + 1} + \frac{2B - A}{AP} - \frac{B}{AP - 1}\right]\right\}$$

式中 A、B 为系数.

状态方程：用 Tillotson 状态方程

对于凝聚态或压缩态，即 $\frac{\rho}{\rho_0} > 1$ 和 $I < I_s$ 时

$$P = P_c = \left[a + \frac{b}{\frac{I}{I_0\eta^2} + 1}\right] I\rho + A\mu + B\mu^2 \tag{4-5-22}$$

对于膨胀态，即$\frac{\rho}{\rho_0}<1$，且$I>I_s'$时

$$P = P_E = aI\rho + \left[\frac{-bI\rho}{\frac{I}{I_0\eta^2} + 1} + A\mu e^{-\beta\left(\frac{\rho_0}{\rho}-1\right)}\right] e^{-\alpha\left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1\right)^2}$$

当$\frac{\rho}{\rho_0}<1$，且$I_s<I<I_s'$时

$$P = \frac{(I - I_s)P_E + (I_s' - I)P_c}{I_s' - I_s}$$

式中

$$\eta = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad \mu = \frac{\rho}{\rho_0} - 1$$

a，b，A，B，I_0，I_s、I_s'、α 和 β 均为材料常数.

射流方程 6 个(未标脚标 j)：

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho r = -\frac{\partial}{\partial r}\rho ur - \frac{\partial}{\partial z}\rho vr \tag{4-5-23}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho ur = -\frac{\partial}{\partial r}(Pr + \rho u^2 r) - \frac{\partial}{\partial z}\rho uvr \tag{4-5-24}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho vr = -\frac{\partial}{\partial r}\rho uvr - \frac{\partial}{\partial z}(Pr + \rho v^2 r) \tag{4-5-25}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho Er = -\frac{\partial}{\partial r}(\rho Eur + uPr) - \frac{\partial}{\partial z}(\rho Evr + vPr) \tag{4-5-26}$$

$$T = \left(T_0 + \frac{E_s}{C_v}\right) e^{AP\ln\frac{\rho}{\rho_0}} \tag{4-5-27}$$

$$P = f(\rho, I) \tag{4-5-28}$$

4.5.2 程序总框

守恒方程用“和”分裂格式，分为三步进行，坐标和示踪点布置见图 4-5-1，总框见图 4-5-2.

一、输入初值和外形

(1)材料常数：状态方程、强度和温度公式中的常数等.

(2)网格参量：网格号 K

$$K = (j - 1)i_{max} + i + 1$$

可见 K 从 2 开始. 每个网格顶及右侧的面积，等等.

(3)网格初始参量，m，u，v，P，I，S_z，S_r，τ，MF 共 9 个，MF 是旗号，小于 1000 为纯格材料号大于 100 为混合号.

(4)示踪点，在内界面和自由界面设置示踪点(见图 4-5-1)，材料在示踪点走向的左侧，首尾封闭重合. 内界面二侧材料示踪点坐标重合. 以二维数组 $TX[N,L]$和 $TY[N,L]$. 表示坐标，N 为材料号，L 为某材料的示踪点号. 通过示踪点坐标的输入，材料外形也输入了.

(5)混合格，在界面上将示踪点坐标移动 10^{-4}网格边长，示踪点进入的格即成为混合格，

除纯格中的 9 个量外，还要输入混合格专有的 7 个量（均为二维数组），在此输入 3 个：$m[N,M]$，$\rho[N,M]$，$I[N,M]$，M 为混合格编号，还有四个量：顶面积、右侧面积、顶部流量和右侧面流量在“混合格流量”步中给出.

(6)其它量，如格子尺寸，区域尺寸，总格子数，又如控制误差：系统总能量相对误差，压力迭代误差，Δt 的最小值等，

二、计算压力.

混合格由输运步得到网格各组分质量 m_N，求各组分体积 V_N 和压力 P，由

$$P = f\left(\frac{m_N}{V_N}, I_N\right)_{N=1} = f\left(\frac{m_N}{V_N}, I_N\right)_{N=2} = \cdots$$

迭代求得 P 和 V_N. 取网格对角线长为 s，取系数 k，由

$$\Delta t \leqslant \min_{ij} k \frac{s}{c}$$

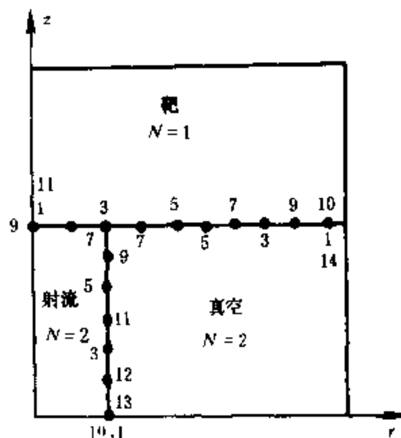


图 4-5-1 HELP 法坐标与示踪点

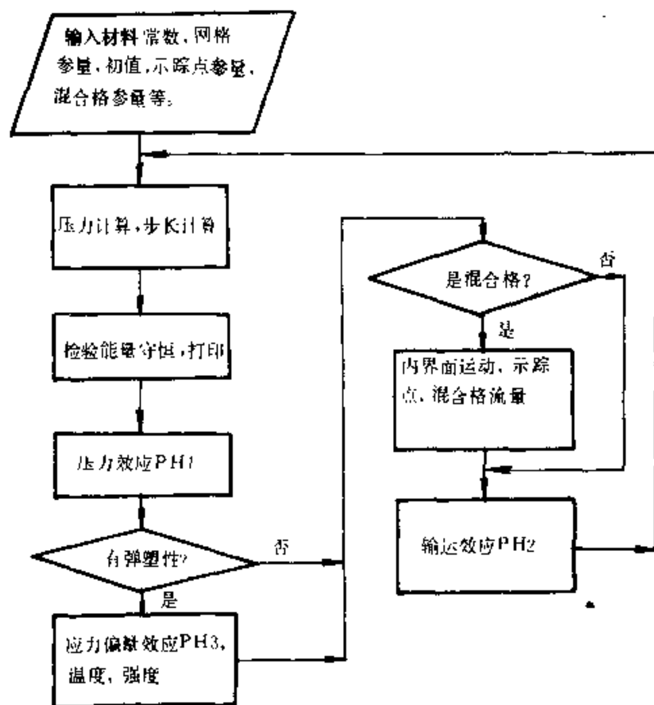


图 4-5-2 HELP 程序总框

算出 Δt 作为下一步步长，式中 c 为音速.

三、检验能量守恒.

t 时刻所有格子总能量为 E_t，即

$$E_s = \sum_k m(k)\left[\frac{1}{2}(u(k)^2 + v(k)^2) + I(k)\right]$$

实际计算域的总能量 E_t 为系统初始总能量，通过边界输入和输出能量及外界对系统作的功的总和，若

$$\frac{E_s - E_t}{E_t} < \varepsilon$$

则继续计算，ε 可取某一值如 0.01.

若示踪点太稀，可调子程序加密，若重合了，也可以取消一个示踪点.

计算中需设置输运办界，在边界外面设虚拟格，其物理量与对应网格相同. 但是输运边界不能正确模拟冲击波的到达，为此当冲击波到达输运边界时，启动再分区子程序. 先在径向将二格合并成一个格，再在轴向合并，结果是四个格子合并成一个格子. 在总格子不变条件下，r 和 z 的尺寸增大一倍，计算好合并后的网格各物理量后，继续作差分计算.

4.5.3 守恒方程分裂和压力效应

一、守恒方程

将守恒方程(4-5-1)式至(4-5-4)式改为下面形式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_i \tag{4-5-29}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u_j = -\frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_i u_j + \frac{\partial}{\partial x_i}\sigma_{ij} \tag{4-5-30}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho E_T = -\frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_i E_r + \frac{\partial}{\partial x_i}u_j\sigma_{ij} \tag{4-5-31}$$

式中 $i=1,2,3$，$j=1,2$，下标相同表示和

$(u_1,u_2) = (v,\ u)$，$(x_1,x_2,x_3) = (z,r,\theta)$，

$E_T = I + \frac{1}{2}(u^2 + v^2)$

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix}\sigma_z & \tau & 0\\ \tau & \sigma_r & 0\\ 0 & 0 & \sigma_\theta\end{bmatrix} \qquad \sigma_{ij} = S_{ij} - \delta_{ij}P \qquad \delta_{ij} = \begin{cases}1 & i = j\\ 0 & i \neq j\end{cases} \tag{4-5-32}$$

当(4-5-29)、(4-5-30)、(4-5-31)式在网格体积上积分，调换积分微分次序，由高斯公式将体积分化为面积分，即

$$\int_V \frac{\partial\rho}{\partial t}\mathrm{d}V = \frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\mathrm{d}V = \frac{\partial}{\partial t}m \tag{4-5-33}$$

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_i\mathrm{d}V = \int_s \rho u_i n_i \mathrm{d}S \tag{4-5-34}$$

则守恒方程式为

		PH1	PH3	PH2	
Δm	=			$-\Delta t\int_s \rho u_i n_i ds$	(4-5-35)
$\Delta(m\ u_j)$	=	$-\Delta t\int_s P n_j ds$	$+\Delta t\int_s S_{ij} n_i ds$	$-\Delta t\int_s \rho u_i u_j n_i ds$	(4-5-36)
$\Delta(m\ E_T)$	=	$-\Delta t\int_s P u_i n_i ds$	$+\Delta t\int_s S_{ij} u_j n_i ds$	$-\Delta t\int_s \rho u_i E_T n_i ds$	(4-5-37)

二、PH1(见图 4-5-3)

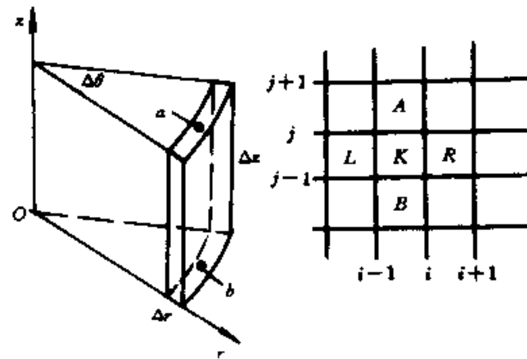


图 4-5-3　HELP 法控制元称号

轴向：$\Delta(mv) = -\Delta t\int_s P n_i \mathrm{d}s$　　(4-5-38)

$$P_b^n = \frac{1}{2}(P_K + P_B)^n$$

$$P_a^n = \frac{1}{2}(P_K + P_A)^n$$

$$m_k^n(\tilde{v}_K - v_K^n) = \Delta t(P_b - P_a)^n\pi(r_i^2 - r_{i-1}^2)$$

$$\tilde{v}_K = v_K^n + \frac{\Delta t}{m_K^n}(P_b - P_a)^n\pi(r_i^2 - r_{i-1}^2) \tag{4-5-39}$$

径向：$\Delta(mu) = -\Delta t\int_s P n_i \mathrm{d}s$　　(4-5-40)

$$P_l = \frac{1}{2}(P_K + P_L),$$

$$P_r = \frac{1}{2}(P_K + P_R) \qquad P_s = \frac{1}{2}(P_l + P_r)$$

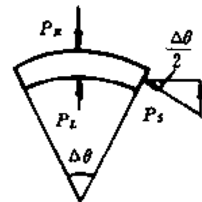


图 4-5-4　径向动量计算图

如图 4-5-4 所示，P_s 的径向分量为　$P_s\sin\frac{\Delta\theta}{2} \approx P_s\frac{\Delta\theta}{2}$

$$\frac{\Delta\theta}{2\pi}\frac{\Delta(mu)}{\Delta t} = P_l r_{i-1}\Delta\theta\Delta z - P_r r_i\Delta\theta\Delta z + P_s\Delta\theta(r_i - r_{i-1})\Delta z$$

$$= \Delta\theta\Delta z\frac{1}{2}(P_l - P_r)(r_i + r_{i-1})$$

$$\tilde{u}_K = u_k^n + \frac{\Delta t}{m_K^n}\pi\Delta z(P_l^n - P_r^n)(r_i + r_{i-1}) \tag{4-5-41}$$

能量：$\frac{\Delta(mE_T)}{\Delta t} = -\int_V \frac{\partial}{\partial x_i}P u_i \mathrm{d}V$　　(4-5-42)

$$\Delta(mE_T) = \Delta(mI) + u_j\Delta(mu_j)$$

$$= \Delta(mI) + u_j\left(-\Delta t\int_s P n_i \mathrm{d}s\right) - \int_V \frac{\partial}{\partial x_i}P u_i \mathrm{d}V$$

$$= -\int_V P\frac{\partial}{\partial x_i}u_i \mathrm{d}V - \int_V u_i\frac{\partial P}{\partial x_i}\mathrm{d}V$$

$$= -\int_V P\frac{\partial}{\partial x_i}u_i \mathrm{d}V - u_i\int_s P n_i \mathrm{d}s$$

则(4-5-42)式成为：$\frac{\Delta(mI)}{\Delta t}=-\int_V P\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\mathrm{d}V=P\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\pi(r_i^2-r_{i-1}^2)\Delta z$ (4-5-43)

式中 $\frac{\partial u_i}{\partial x_i}$ 是速度矢量的散度，即

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}ru+\frac{\partial v}{\partial z}$$

n 时刻散度：

$$\frac{\partial u_i^n}{\partial x_i}=\frac{1}{r_K}\frac{r_Ru_R^n-r_Lu_L^n}{2\Delta r}+\frac{v_A^n-v_B^n}{2\Delta z}$$

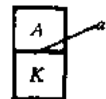
$$\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i}=\frac{1}{r_K}\frac{r_R\tilde{u}_R-r_L\tilde{u}_L}{2\Delta r}+\frac{\tilde{v}_A-\tilde{v}_B}{2\Delta z}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i^n}{\partial x_i}+\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i}\right)$$

由(4-5-43)式得 $\tilde{I}_K=I_K^n+P_K^n\pi(r_i^2-r_{i-1}^2)\frac{\Delta z\Delta t}{m_K^n}\frac{\partial u_i}{\partial x_i}$ (4-5-44)

三、空格问题

对于自由边界格，可能质量 m_K^n 很少，由(4-5-39)和(4-5-41)式算出的 $\tilde{u}$ 和 $\tilde{v}$ 会很大(因为 m_K^n)是分母)，使格子过量输运，成为空格，甚至出现负质量。又如高压气体球膨胀计算中，在45°方向超速运动，使球渐渐趋于方形。梁德寿提出改进方法如下(K 格和 A 格为例)：如图(4-5-5)所示，K 格和 A 格界面为 a



4-5-5 避免超速计算的网格编号

$$P_a=\frac{P_Am_K+P_Km_A}{m_A+m_K} \quad (4\text{-}5\text{-}45)$$

如果 A 格中质量 m_A 很小，则压力 P_A 必然也很小，由(4-5-45)式得到 P_a 也很小。由(4-5-39)式得

$$\tilde{v}_A=v_A^n+\frac{\Delta t}{m_A^n}\pi(r_i^2-r_{i-1}^2)P_a \quad (4\text{-}5\text{-}46)$$

$$\tilde{v}_a=\frac{\tilde{v}_Km_K^n+\tilde{v}_Am_A^n}{m_K^n+m_A^n} \quad (4\text{-}5\text{-}47)$$

由于 P_a 不会因 m_A 很小而变得很大，从而避免了不正常的超速。计算表明，上述改进措施是有效的。

四、人工粘性

HELP 差分格式中的格式粘性对于强激波不够，需加人工粘性，在PH1的压力处加上 q，(4-5-38)式得

$$\Delta(mv)=-\Delta t\int_s(P+q)n_i\mathrm{d}s \quad (4\text{-}5\text{-}48)$$

曾宗元采用如下格式

$$\tilde{u}_K=u_K^n-\frac{\Delta t}{\rho_K^n}\left\{\frac{1}{2V_K}[F_r(P_R-P_K)^n-F_l(P_L-P_K)^n]+\frac{1}{\Delta r}(q_R-q_K)^n\right\} \quad (4\text{-}5\text{-}49)$$

$$\tilde{v}_K=v_K^n-\frac{\Delta t}{\rho_K^n\Delta z}[(P+q)_a^n-(P+q)_b^n] \quad (4\text{-}5\text{-}50)$$

$$\tilde{I}_K=I_K^n-\frac{\Delta t}{\rho_K^nV_K}\left\{\left[P_K^n(F_r\bar{u}_r-F_l\bar{u}_l)+\frac{1}{2}q_r^n(F_R\bar{u}_R+F_K\bar{u}_K)-\frac{1}{2}q_l^n(F_K\bar{u}_K+F_L\bar{u}_L)\right.\right.$$
$$\left.\left.-\bar{u}_KF_K(q_r^n-q_l^n)-\bar{v}_KF_a(q_r^n-q_l^n)+F_a[\bar{v}_a(P_K^n+q_a^n)-\bar{v}_b(P_K+q_b)^n]\right]\right\} \quad (4\text{-}5\text{-}51)$$

式中下标小写为格边量，大写为格心量，F 面积，其下标 r、R、a 是右侧、格心侧、上表面积. V_K 为网格 K 的体积. 参量上加一划意义为

$$\bar{u}_r = \frac{1}{2}(u_n^r + \tilde{u}_r)$$

其它类推 · q 定义在格边，表达式为(见图 4-5-3)

$$q_r{}^n = \begin{cases} Bc_r{}^n\rho_r{}^n(u_k{}^n - u_R{}^n) & k(u^2+v^2)_r^n < (c_r^n)^2,\ u_k^n \geqslant u_R^n \\ 0 & 否则 \end{cases} \tag{4-5-52}$$

$$\begin{cases} Bc_a^n\rho_a^n(v_k{}^n - V_A{}^n) & k(u^2+v^2)_a^n < (c_a^n)^2,\ v_k^n \geqslant v_A^n \\ 0 & 否则 \end{cases} \tag{4-5-53}$$

式中 c 为音速，B，k 为系数，对于 0.9mm/μs 铜打钢的一维平面计算结果见图 4-5-6，取 $k=0.8$，$B=1.0$，不加 q 时，数值振荡严重，加 q 后，数值振荡消除了.

4.5.4 弹塑性效应

由于欧拉计算不能跟踪质点，因此弹塑性计算不如拉氏法精确.

一、确定应力偏量

求 $n+1$ 时刻的 K 格心偏量值. 步骤如下：

(1) 求 $n+1$ 时刻 K 格心质点在 n 时刻坐标 $p(r,z)$

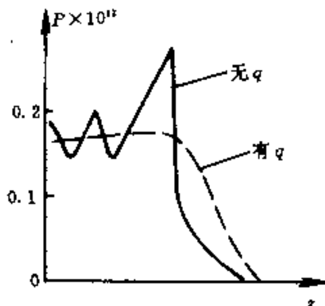


图 4-5-6 人工粘性对计算的影响

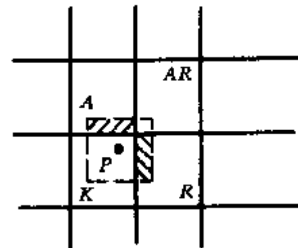


图 4-5-7 面积加权示意图

$$r_p = r_K - u_K^n \Delta t$$
$$z_p = z_K - v_K^n \Delta t \tag{4-5-54}$$

(2) 用面积加权求 p 点应变率

$$\dot{\varepsilon}_{zp}^n = \left(\frac{\Sigma\dot{\varepsilon}_{za}f_a}{\Sigma f_a}\right)^n \tag{4-5-55}$$

$$\dot{\varepsilon}_{rp}^n = \left(\frac{\Sigma\dot{\varepsilon}_{ra}f_a}{\Sigma f_a}\right)^n \tag{4-5-56}$$

$$\dot{\gamma}_p^n = \left(\frac{\Sigma\dot{\gamma}_a f_a}{\Sigma f_a}\right)^n \tag{4-5-57}$$

α 为 K，R，AR，A. 见图 4-5-7，f_a 为加权面积.

以上是 p 点在 t^n 时刻的应变率，设在 Δt 期间未变，则

$$\Delta\varepsilon_{zp}^{n} = \dot{\varepsilon}_{zp}^{n}\Delta t \tag{4-5-58}$$

$$\varepsilon_{zK}^{n+1} = \varepsilon_{zK}^{n} + \Delta\varepsilon_{zp}^{n} \tag{4-5-59}$$

同理求得 ε_{rK}^{n+1} 和 γ_{K}^{n+1}. 再用同样面积加权法求得 p 点的角速度 Ω_p^n 和应力偏量 S_{zp}^n，S_{rp}^n 和 τ_p^n，其中 $\Omega_p^n = \left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial r}\right)_p^n$.

(3) 求 $n+1$ 时刻偏量，由广义虎克定律

由(4-5-12)式 $S_{rK}^{n+1} = (S_{rp} + 2G\Delta\varepsilon_{rp} + 2\tau_p\Omega_p\Delta t)^n$ (4-5-60)

由(4-5-13)式 $S_{zK}^{n+1} = (S_{zp} + 2G\Delta\varepsilon_{zp} - 2\tau_p\Omega_p\Delta t)^n$ (4-5-61)

由(4-5-15)式 $\tau_K^{n+1} = \tau_p + 2G\Delta\gamma_p - (S_{rp} - S_{zp})\Omega_p\Delta t)^n$ (4-5-62)

二、屈服判据

取材料为理想塑性材料用 Von Mises 屈服准则，

$$M_i = (S_z^{n+1})^2 + (S_r^{n+1})^2 + (S_\theta^{n+1})^2 + 2(\tau^{n+1})^2 \leqslant \frac{2}{3}Y^2 \tag{4-5-63}$$

不作改变，如果

$$M_i > \frac{2}{3}Y^2$$

则以 $(S_z^{n+1}, S_r^{n+1}, S_\theta^{n+1}, \tau^{n+1})^T \cdot \left(\frac{2Y^2}{3M_i}\right)^{\frac{1}{2}}$ 代替 $(S_z^{n+1},\ S_r^{n+1},\ S_\theta^{n+1},\ \tau^{n+1})^T$

为了提高精度，将步长分为 N 个子步进行

$$\Delta_1 t = \frac{N\Delta t}{N(N+1)/2},\ \Delta_2 t = \frac{(N-1)\Delta t}{N(N+1)/2},\ \cdots \tag{4-5-64}$$

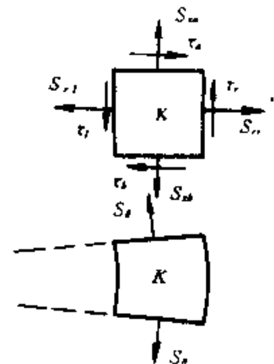
$$\Delta_N t = \frac{\Delta t}{N(N+1)/2}.$$

一般取 $N=4$，由上式可见，子步长按级数下降.

三、守恒方程中应力偏量效应

(1) 由(4-5-36)式中 $PH3$ 得

$$\Delta(mu_j) = \Delta t\int_s S_{ij}n_i\mathrm{d}s \tag{4-5-65}$$



4-5-8 K 格偏应力状态示意图

K 格偏应力状态见图 4-5-8。

轴向动量：

$$\Delta(mv) = m_K(\tilde{\tilde{v}}_K - \tilde{v}_K)$$

$$= (S_{za} - S_{zb})^n\pi(r_i^2 - r_{i-1}^2)\Delta t + \tau_r^n 2\pi r_i\Delta z\Delta t - \tau_l^n 2\pi r_{i-1}\Delta z\Delta t \tag{4-5-66}$$

径向动量 $\frac{\Delta\theta}{2\pi}m_K^n(\tilde{\tilde{u}} - \tilde{u}) = \frac{\Delta\theta}{2\pi}\pi(r_i^2 - r_{i-1}^2)(\tau_a - \tau_b)^n\Delta t + S_{rr}^n 2\pi r_i\frac{\Delta\theta}{2\pi}\Delta z\Delta t$

$$- S_{rl}^n 2\pi r_{i-1}\frac{\Delta\theta}{2\pi}\Delta z\Delta t - S_\theta^n\Delta\theta\Delta z\Delta r\Delta t \tag{4-5-67}$$

$$m_K^n(\tilde{\tilde{u}}_K - \tilde{u}_K) = 2\pi\Delta t[(\tau_a - \tau_b)^n r_K\Delta r + \Delta z(S_{rr}r_i - S_{rl}r_{i-1}) - S_\theta\Delta z\Delta r] \tag{4-5-68}$$

(2) 由能量方程(4-5-37)式中 $PH3$ 得

$$\Delta(mE_T) = \Delta t\int_s S_{ij}u_jn_i\mathrm{d}s \tag{4-5-69}$$

$S_{ij}u_jn_i$ 是应力偏量作用在格子各面上的单位面积功率

$$\frac{\Delta(mE_T)}{\Delta t} = (S_{za}v_a + \tau_a u_a - S_{zb}v_b - \tau_b u_b)\pi(r_i^2 - r_{i-1}^2)$$
$$+ 2\pi r_i \Delta z(S_{rr}u_r + \tau_r v_r) - (S_{ru}u_l + \tau_1 v_1)2\pi r_{i-1}\Delta z$$

消去功能项得 $m_K(\tilde{\tilde{I}}_K - \tilde{I}_K) = 2\pi r_K \Delta r \Delta t(S_{za}\tilde{v}_a + \tau_a\tilde{u}_a - S_{zb}v_b - \tau_b\tilde{u}_b) + 2\pi r_i \Delta z \Delta t(S_{rr}\tilde{u}_r + \tau_r\tilde{v}_r)$

$$- 2\pi r_{i-1}\Delta z \Delta t(S_{rl}\tilde{u}_l + \tau_l\tilde{v}_l) - \frac{1}{2}m_K^n(\tilde{\tilde{u}}^2 - \tilde{u}^2 + \tilde{\tilde{v}}^2 - \tilde{v}^2)_K \qquad (4\text{-}5\text{-}70)$$

于是，$\tilde{\tilde{u}}$、$\tilde{\tilde{v}}$ 和 $\tilde{\tilde{I}}$ 都求得了．对于混合格，$\tilde{\tilde{u}}$ 和 $\tilde{\tilde{v}}$ 求法同纯格，$\tilde{\tilde{I}}$ 先按纯格公式求出后，按体积百分数分配．计算时也要用子步长，同(4-5-64) 式．

四、强度计算

若 K 格为纯格，若材料密度和常规密度（在此取材料初始密度 ρ°）之比小于某值，则认为材料已经破坏，不进行强度计算，对于流体也不计算强度．若需要计算，则可由(4-5-21)式求温度 T，由(4-5-20)式求强度 Y．对于混合格，将各种材料的内能及参数和系数分别代入(4-5-21)和(4-5-20)式计算 T_N 和 Y_N，然后按各材料在混合格中的质量加权计算强度．

4.5.5 材料交界面计算

HELP 程序的主要特色就是能够显示混合网格中的材料内界面，而且可以计 算网格中有三种材料的情况，这主要在材料交界面程序段完成，它是 HELP 中逻辑关系最复杂的部分，计算量也很大，耗费了整个 HELP 计算的大部分机时．

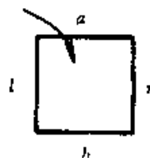


图 4-5-9　预置法则，一次相交之一

一、网格边材料面积的确定

网格边分示踪线不相交，一次相交和多次相交三种情况，按预置法则和再置法则确定边界材料性质．

(1) 预置法则，示踪线进入网格时进行，分两种情况：

a．一次相交．设从顶边进入示踪线，代表材料 N(4-5-9)

① 进入边为混合边，前进方向左侧为 N 材料；

② 按顺时针次序置其它边为 N 材料；

③ 若遇到混合材料边，则该边及以后的边均不预置，在图 4-5-10 中 b，l 边不预置；

④ 若 K 格的下格或左格是纯格，则不预置；

⑤ $J=1$ 格的底边和 $I=1$ 格的左边不预置．

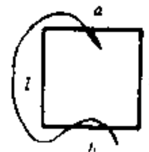


图 4-5-10　预置法则，一次相交之二

b．二次相交．设在顶面有示踪线两次相交，图 4-5-11 中第一个交点 1 的材料 N 面积为 14 段，以 f_{14}计，第二个交点 2 的 N 面积为 f_{23}，顶面总面积为 F，若：

$f_{14} + f_{23} > F$，则 r，b 和 l 边不预置，顶面 N 材料面积为：$f_{14} + f_{23} - F$．如果是图 4-5-12 情况，即

$f_{14} + f_{23} < F$，则预置法则同"一次相交"情况，N 材料面积为 $f_{14} + f_{23}$．

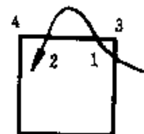


图 4-5-11　预置法则，二次相交之一

(2) 再置法则．示踪线离开网格时进行，也分两种情况：

a．一次相交

① 相交边为混合边，前进方向左侧为 N 材料；

② 顺时针依次将其它边的材料置 0;

③ 遇到混合边,则该边及以后的边均不再置;

④ 下格或左格如果是纯格,不再置;

⑤ $J=1$ 格的底边,$I=1$ 格的左边,不再置.

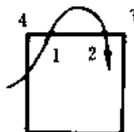


图 4-5-12 预置法则,二次相交之二

b. 二次相交,情况和预置法则类似,若 $f_{14}+f_{23}>F$,则 N 材料面积为 $f_{14}+f_{23}-F$,顺时针置其余边材料为 0,若 $f_{14}+f_{23}<F$,则 N 材料面积为 $f_{14}+f_{23}$,其余边不再置. 至此 N 材料的网格边界确定完毕。用同样的方法确定混合网格中其它材料 的边界面积,才算把混合网格的格边材料面积

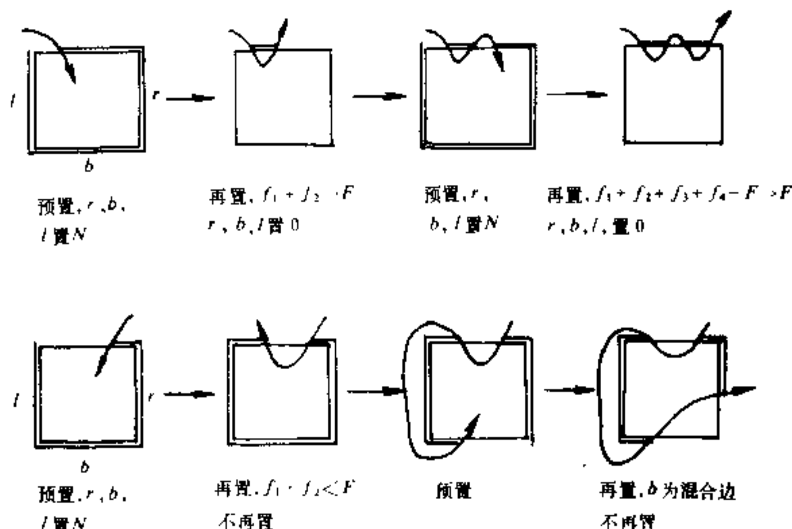
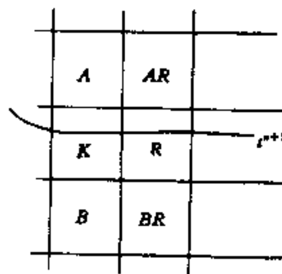


图 4-5-13 网格边材料的确定

确定完. 下面是几个交界面的复杂实例,见图 4-5-13. 图中双线部分表示该面积置 N 材料.

二、材料界面越过网格

(1) 确定越过网格的材料密度. 当 N 材料示踪线进入 K 格,需要确定进入 K 格 N 材料的密度 ρ_K,设 t^{n+1}时刻示踪线与 K 格右边相交(图 4-5-14)为了确定 ρ_K,需要看 t^n 时刻情况,按图 4-5-15 进行. 若 t^{n+1}时刻,N 材料界面与格顶相交,则另外有一套判判断逻辑以确定 ρ_K 值,原理与上类似.



4-5-14 确定材料密度的网格称号

(2) 混合格变纯格. 若所有材料界面切割 K 格边的部分面积 $f=0$ 或 $f=F$,则 K 格为纯格,则

① 改为纯格编号;

② 确定纯格材料号,为此要考察 t^n 时刻邻格情况. 若有纯格,则将其材料号作为本格的材料号. 如果没有纯格,则取左格或底格共边的材料号;

③ 置 K 格部分面积为 N 材料全面积;

④ K 格中排出材料的密度置 0;

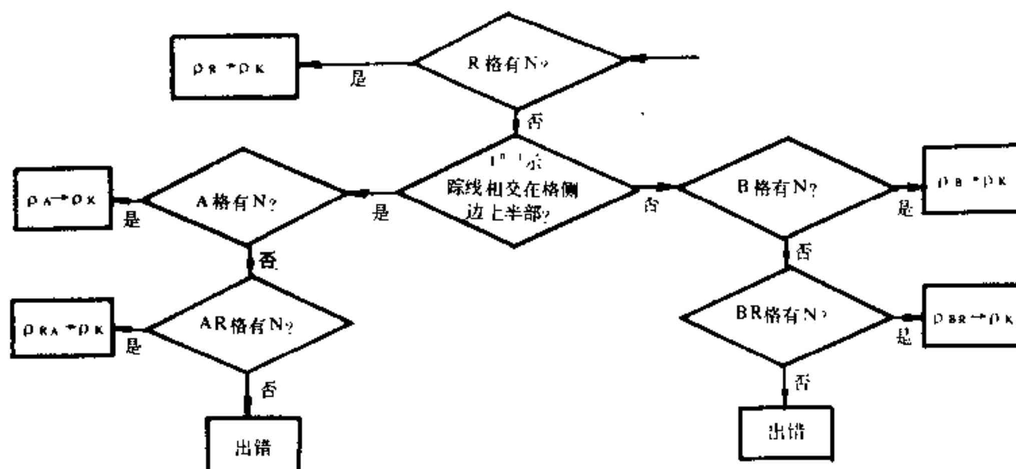


图 4-5-15　进入 K 格材料密度 ρ_K 的确定

⑤ 使 K 格中排出材料 N_{out} 的质量为 0，为此计算 N_{out} 每个边的输运量，相加得总输运量 m_{out}' 而 K 格中实有量为 m_{out}，则每个边的输运量乘 $\frac{m_{out}}{m_{out}'}$. 如果 K 格中材料质量仍不为 0，尚须作第二次调整.

三、混合格顶边和右边流量输运计算

N 材料右边输运量 δm_R，f_N^n 为部分面积，

$$\delta m_R = \overline{u}_N f_N^n \rho_N^n \Delta t \tag{4-5-71}$$

式中

$$\overline{u} = \frac{0.5(\tilde{u}_K + \tilde{u}_R)}{1 + \frac{\Delta t(\tilde{u}_R - \tilde{u}_K)}{\Delta r}} \tag{4-5-72}$$

$\overline{u}_N^n$ 的物理意义是设 u_K 到 u_R 之间速度为线性变化(图 4-5-16)，A 点在 Δt 后到达格边(图中设 u_K，u_R 均为正)，A 点的速度就是 $\overline{u}_N^n$. 顶边输运计算与此类似.

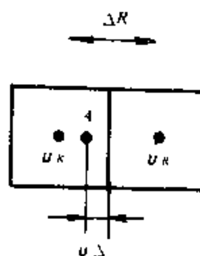


图 4-5-16　网格边输运量计算图

四、示踪点坐标

方法同 PIC Code，以示踪点为中心，画 $\Delta R \Delta z$ 方形，按面积加权法将覆盖到的四个格心速度平均得到示踪点速度.

4.5.6　输运效应(PH2)和压力计算

(1) 纯格，由(4-5-35)式

$$\Delta m = m^{n+1} - m^n = -\Delta t \int_s \rho u_i n_i \mathrm{d}s \tag{4-5-73}$$

右边面积 F_r，输运量 δm_R

$$\delta m_R = \rho_{D.C.} \overline{u} F_r \Delta t \tag{4-5-74}$$

$\bar{u}$ 的计算同(4-5-72)式，$\rho_{D.C.}$ 为贡献格密度，四个边输运量的总和为 $\Sigma\delta m$，则

$$m^{n+1} = m^n - \Sigma\delta m \tag{4-5-75}$$

由(4-5-36)式 $\Delta(mu_j) = -\Delta t\int_s(\rho u_i u_j)n_i \mathrm{d}s$ (4-5-76)

右边的 R 方向动量输运量为 $\delta(mu)_R = \delta m_R \tilde{\tilde{u}}_{D.C.}$，四个方向总和为 $\Sigma\delta(mu)$，则

$$m^{n+1}u^{n+1} - m^n\tilde{\tilde{u}} = \Sigma\delta(mu) \tag{4-5-77}$$

由此求得 u_T^{n+1}，同理求得 v^{n+1}.

由(4-5-37)式

$$\Delta(mE_T) = -\Delta t\int_s \rho u_i E_T n_i \mathrm{d}s \tag{4-5-78}$$

右边的能量输运 $\delta(mE_T)_R = \delta m_R\left(\tilde{I} + \dfrac{\tilde{\tilde{u}}^2 + \tilde{\tilde{v}}^2}{2}\right)_{D.C.}$

四个边的总能量输运为 $\Sigma\delta(mE_T)$，则

$$m^{n+1}E_T{}^{n+1} - m^n\tilde{\tilde{E}}^T = \Sigma\delta(mE_T) \tag{4-5-79}$$

由此求得 E_T^{n+1}，而

$$I^{n+1} = E_T{}^{n+1} - \frac{1}{2}(u^2 + v^2)^{n+1} \tag{4-5-80}$$

(2) 混合格. 前面(4-5-71)式已求出 N 材料右边输运量，由此求得 N 材料的质量 m_N^{n+1}，同理求出其它材料的质量，相加即得混合格总质量 m^{n+1}，求 u^{n+1} 和 v^{n+1} 方法同纯格. 能量输运复杂一些，首先将 K 格内能 $\tilde{I}$ 按体积百分数分配给各材料，得 $\tilde{I}_N$，再计算

$$\tilde{\tilde{E}}_{TN} = \tilde{I}_N + \frac{1}{2}(\tilde{\tilde{u}}^2 + \tilde{\tilde{v}}^2) \tag{4-5-81}$$

计算四个边的能量输运量 $\Sigma\delta m_N\tilde{\tilde{E}}_{TN}$，其中 δm_N 是某边 N 材料的输运量，则

$$m_N^{n+1}E_{TN}^{n+1} - m_N^n\tilde{\tilde{E}}_{TN} = \Sigma\delta m_N\tilde{\tilde{E}}_{TN} \tag{4-5-82}$$

由此得到 $n+1$ 时刻 N 材料比内能 E_{TN}^{n+1}，比内能由下式给出

$$I_N^{n+1} = E_{TN}^{n+1} - \frac{1}{2}(u^2 + v^2)^{n+1} \tag{4-5-83}$$

同理求出其它材料的 $n+1$ 时刻比内能. 至此输运工作结束，即可转入 4.5.2 的 2 中压力计算.

在本程序段中尚有一些功能，修正输运中出现的不合理现象，有时由于超量输运或计算误差出现格内质量为负，此时将该格材料质量置 0，再找邻格中该材料质量最大的格子，扣除此负质量数，最后，按守恒律调整有变动的二个格子的参量. 如果某格子密度≤0，但质量却大于 0，就令质量和密度均匀为 0.

4.5.7 HELP 程序应用及改进

HELP 适于计算多种材料的大变形问题，能够清晰显示界面，用于计算炸药——金属爆炸驱动问题、射流形成和侵彻问题、应力波的传播、冲击波相互作用、高速碰撞和终点效应等问题. 图 4-5-17 是 105mm 聚能装药射流形成计算图形[12].

HELP 程序的 1970 年版本存在如下一些问题：

(1) 对于强冲击波，程序原有格式粘性不够，要根据情况加人工粘性；

(2) 自由界面处理得不好，出现空格和超速现象；

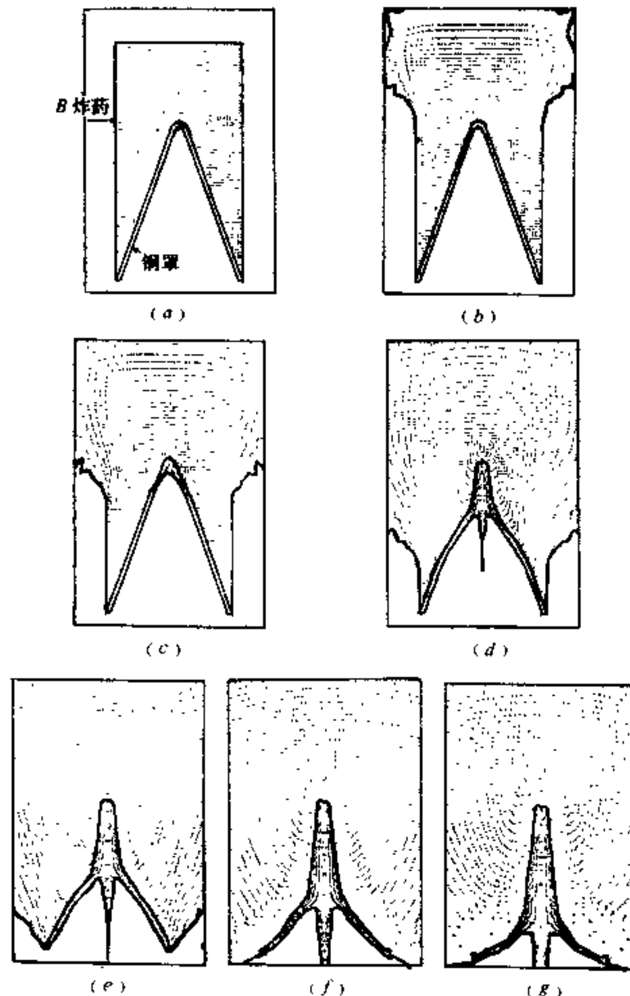


图 4-5-17 105mm 聚能装药射流形成过程

(a) $t=0$; (b) $t=5.93\mu s$; (c) $t=9.76\mu s$; (d) $t=15.2\mu s$;

(e) $t=18.7\mu s$; (f) $t=23.3\mu s$; (g) $t=27.6\mu s$

(1) 对于强冲击波，程序原有格式粘性不够，要根据情况加人工粘性；

(2) 自由界面处理得不好，出现空格和超速现象；

(3) 没有考虑滑动边界，由于混合格中内界面上二种材料示踪点是重合在一起的，以同一速度运动，不能显示材料切向滑动，也不能显示材料分离；

(4) 由于示踪线构成的材料交界面过于复杂，难以扩展到三维计算；

(5) 没有考虑应力的旋转修正量，我国已将其加上了.

我国学者对 HELP 进行了许多改进，现再举梁德寿的几点改进[13]：

(1) 混合格流量计算原来用 n 时刻部分面积，现用 n 时刻和 $n+1$ 时刻的平均值，提高精度；

(2) 混合格的密度原程序是在压力迭代时计算的，现改为直接求混合格中材料部分体积，

求得密度.

(3) 输入子程序中的语句原有 800 多句,现将其统一化,更为简洁方便,语句减为 470 多句.

国外新的 HELP 版本有较大改进,增加了滑移线计算和冲塞断裂计算的功能[14].

§4.6 HEMP 方法

六十年代以来,国外出现了不少二维拉格朗日程序,其中 wilkins 的 HEMP(Hydrodynamic Elastic Magneto Plastic)方法是一个应用较为广泛的程序[15],HEMP 以及类似的程序在我国也应用得较为普遍,因此我们选择 HEMP 作为拉氏典型程序作介绍.

4.6.1 控制方程组

采用二维轴对称流体弹塑性模型,欧拉坐标 x,r,见图 4-6-1,正应力 σ_r, σ_x, σ_θ, 应力偏量 S_r, S_x, S_θ,剪应力 τ,密度 ρ,脚标 0 表示初始值,相对比容 $V=\frac{\rho_0}{\rho}$,参量上加点,例如 $\dot{r}$ 在欧拉坐标中为 $\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}$,在拉氏坐标中为 $\frac{\partial r}{\partial t}$,在此 $r=r(x_0,r_0,t)$,x_0 和 r_0 为该质点的拉氏坐标.

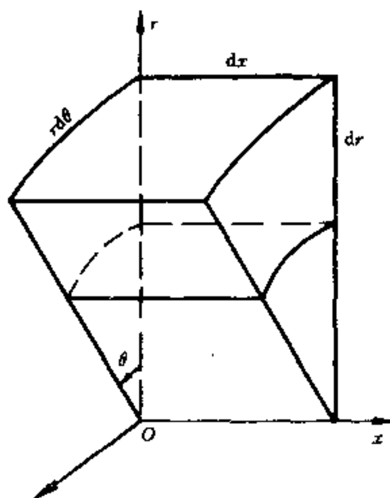


图 4-6-1 HEMP 法的坐标系

守恒方程

$$\frac{\dot{V}}{V}=\frac{\dot{r}}{r}+\frac{\partial\dot{r}}{\partial r}+\frac{\partial\dot{x}}{\partial x} \tag{4-6-1}$$

$$\frac{\rho_0}{V}\ddot{x}=\frac{\partial\sigma_x}{\partial x}+\frac{\partial\tau}{\partial r}+\frac{\tau}{r} \tag{4-6-2}$$

$$\frac{\rho_0}{V}\ddot{r}=\frac{\partial\tau}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_r}{\partial r}+\frac{1}{r}(\sigma_r-\sigma_\theta) \tag{4-6-3}$$

$$\rho_0\dot{e}=-(P+q)\dot{V}+V\Big[S_x\frac{\partial\dot{x}}{\partial x}+S_r\frac{\partial\dot{r}}{\partial r}+S_\theta\frac{\dot{r}}{r}+\tau\Big(\frac{\partial\dot{x}}{\partial r}+\frac{\partial\dot{r}}{\partial x}\Big)\Big] \tag{4-6-4}$$

状态方程(金属)

$$P=a\Big(\frac{1}{V}-1\Big)+b\Big(\frac{1}{V}-1\Big)^2+c\Big(\frac{1}{V}-1\Big)^3+\frac{d}{V}e \tag{4-6-5}$$

式中 a、b、c、d 为系数.

人工粘性

$$q=\begin{cases}\dfrac{c_0^2\rho_0A}{V}\Big(\dfrac{\dot{V}}{V}\Big)^2 & \dot{V}<0\\[2mm] 0 & \dot{V}\geqslant 0\end{cases} \tag{4-6-6}$$

式中 A 为网格面积 c_0 为系数,约为 2.

应力偏量

$$\begin{bmatrix}\dot{S}_x\\ \dot{S}_r\\ \dot{S}_\theta\\ \dot{\tau}\end{bmatrix}=2\mu\begin{bmatrix}\dot{\varepsilon}_x-\dfrac{\dot{V}}{3V}\\ \dot{\varepsilon}_r-\dfrac{\dot{V}}{3V}\\ \dot{\varepsilon}_\theta-\dfrac{\dot{V}}{3V}\\ \dot{\varepsilon}_{xr}\end{bmatrix}+\frac{1}{\Delta t}\begin{bmatrix}\Delta\delta_x\\ \Delta\delta_r\\ 0\\ \Delta\delta_{xr}\end{bmatrix} \tag{4-6-7}$$

式中 μ 为剪切模量.

旋转修正量

$$\Delta\delta_x=\frac{S_x-S_r}{2}(\cos 2\alpha-1)-\tau\sin 2\Delta\alpha$$
$$\Delta\delta_r=-\Delta\delta_x \tag{4-6-8}$$
$$\Delta\delta_{xr}=\tau(\cos 2\Delta\alpha-1)+\frac{S_x-S_r}{2}\sin 2\Delta\alpha$$
$$2\Delta\alpha=\Delta t\left(\frac{\partial\dot{r}}{\partial x}-\frac{\partial\dot{x}}{\partial r}\right)$$

屈服条件(Mises)

$$J_2=\tau^2-S_rS_\theta-S_\theta S_x-S_xS_r \tag{4-6-9}$$

$$K=\begin{cases}\dfrac{Y_s}{\sqrt{3J_2}} & J_2>\dfrac{Y_s^2}{3}\\ 1 & J_2\leqslant\dfrac{Y_s^2}{3}\end{cases} \tag{4-6-10}$$

$$K(S_x,S_r,S_\theta,\tau)^T\longrightarrow(S_x,S_r,S_\theta,\tau)^T \tag{4-6-11}$$

式中 J_2 为偏应力第二状态不变量，Y_s 为单向拉伸屈服极限.

应力张量分量

$$\begin{bmatrix}\sigma_x\\ \sigma_r\\ \sigma_\theta\\ \tau\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}S_x-(P+q)\\ S_r-(P+q)\\ S_\theta-(P+q)\\ \tau\end{bmatrix} \tag{4-6-12}$$

4.6.2 偏导数的积分形式

在差分计算中，把区域划分为许多面元，如图 4-6-2 所示，取面元的面积为 A，边界线为 c，c 上某一段线元为 ds，其外法线方向为单位矢量为 $\boldsymbol{n}$，切向单位矢量为 $\boldsymbol{t}$，坐标的单位矢量 x 方向为 $\boldsymbol{i}$，r 方向为 $\boldsymbol{r}$，某函数 F 的偏导数为

$$\frac{\partial F^\Delta}{\partial x}=\lim_{A\to 0}\frac{\oint_c F\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{i}\,ds}{A}=\lim_{A\to 0}\frac{\oint_c F\,dr}{A} \tag{4-6-13}$$
$$\frac{\partial F^\Delta}{\partial r}=\lim_{A\to 0}\frac{\oint_c F\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}\,ds}{A}=\lim_{A\to 0}\frac{-\oint_c F\,dx}{A}$$

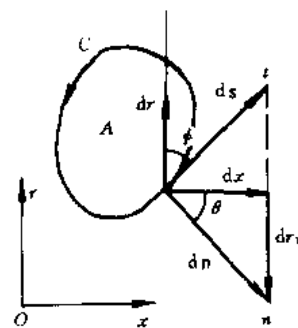


图 4-6-2 偏导数的积分形式计算图

现证明和普通定义的偏导数等价.

设函数 F、$\frac{\partial F}{\partial}$和$\frac{\partial F}{\partial r}$在 A 上连续，c 上线元切向矢量为 ds

$$d\boldsymbol{s}=ds\boldsymbol{t}=dx\boldsymbol{i}+dr\boldsymbol{r}$$

$$t = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s}\boldsymbol{i} + \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}s}\boldsymbol{r} \tag{4-6-14}$$

线元法向矢量 $\mathrm{d}\boldsymbol{n} = \mathrm{d}n \cdot \boldsymbol{n} = \mathrm{d}x\boldsymbol{i} + \mathrm{d}r_1\boldsymbol{r}$

$$\boldsymbol{n} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n}\boldsymbol{i} + \frac{\mathrm{d}r_1}{\mathrm{d}n}\boldsymbol{r} \tag{4-6-15}$$

$\cos\phi = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}s}$，$\cos\theta = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n}$，而 $\theta = \phi$，

所以 $$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}s} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n} \tag{4-6-16}$$

同理由正弦可得 $$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s} = -\frac{\mathrm{d}r_1}{\mathrm{d}n} \tag{4-6-17}$$

$$\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{i}\mathrm{d}s = \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n}\boldsymbol{i} + \frac{\mathrm{d}r_1}{\mathrm{d}n}\boldsymbol{r}\right) \cdot \boldsymbol{i}\mathrm{d}s = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n}\mathrm{d}s = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}s}\mathrm{d}s = \mathrm{d}r$$

$$\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{r}\mathrm{d}s = \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}n}\boldsymbol{i} + \frac{\mathrm{d}r_1}{\mathrm{d}n}\boldsymbol{r}\right) \cdot \boldsymbol{r}\mathrm{d}s = -\mathrm{d}x$$

由格林公式可得

$$\left.\begin{aligned} \oint_c F\mathrm{d}r &= \iint_A \frac{\partial F}{\partial x}\mathrm{d}A \\ \oint_c F\mathrm{d}r &= -\iint_A \frac{\partial F}{\partial r}\mathrm{d}A \end{aligned}\right\} \tag{4-6-18}$$

在面积 A 上取$\frac{\partial F}{\partial x}$和$\frac{\partial F}{\partial r}$的中值$\overline{\frac{\partial F}{\partial x}}$和$\overline{\frac{\partial F}{\partial r}}$，则

$$\left.\begin{aligned} \oint_c F\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{i}\mathrm{d}s &= \oint_c F\mathrm{d}r = \iint_A \frac{\partial F}{\partial x}\mathrm{d}A = \overline{\frac{\partial F}{\partial x}}A \\ \oint_c F\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{r}\mathrm{d}s &= -\oint_c F\mathrm{d}x = \iint_A \frac{\partial F}{\partial r}\mathrm{d}A = \overline{\frac{\partial F}{\partial r}}A \end{aligned}\right\} \tag{4-6-19}$$

由(4-6-13)式 $\frac{\partial F^{\Delta}}{\partial x} = \lim\limits_{A\to 0}\frac{\overline{\frac{\partial F}{\partial x}}A}{A}$

当 $A\to 0$ 时，面元缩为 B 点得

$$\left.\frac{\partial F^{\Delta}}{\partial x}\right|_B = \left.\overline{\frac{\partial F}{\partial x}}\right|_B \tag{4-6-20}$$

右边由中值定理就是普通定义的偏导数，两者相等，得

$$\frac{\partial F^{\Delta}}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial x} \tag{4-6-21}$$

同理可得 $\frac{\partial F^{\Delta}}{\partial r} = \frac{\partial F}{\partial r}$

4.6.3 差分格式

网格可以是任意四边形，速度定义在格点上，其它量定义在格心上.

(1) 已知格点坐标和 F 值，求格心偏导数，由(4-6-13)式

$$\left.\frac{\partial F}{\partial x}\right|_B \approx \frac{\oint_{1234} F\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{i}\mathrm{d}s}{A} = \frac{\oint_{1234} F\mathrm{d}r}{A}$$

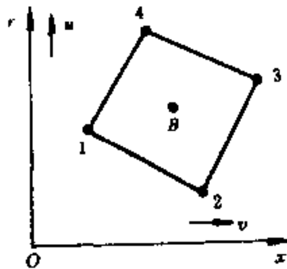


图 4-6-3　求格心偏导数

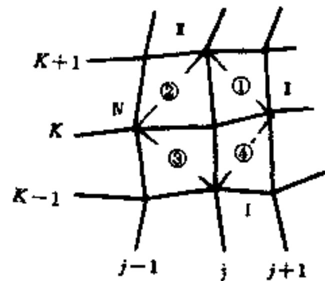


图 4-6-4　求格点偏导数

由图 4-6-3

$$\oint_{1234} F\mathrm{d}r = \overline{F}_{12}(r_2 - r_1) + \overline{F}_{23}(r_3 - r_2) + \overline{F}_{34}(r_4 - r_3) + \overline{F}_{41}(r_1 - r_4)$$

而 $\overline{F}_{12}=\frac{1}{2}(F_1+F_2)$，余类推，得

$$\left.\frac{\partial F}{\partial x}\right|_B = \frac{1}{2A}[(F_2 - F_4)(r_3 - r_1) + (F_3 - F_1)(r_4 - r_2)] \tag{4-6-22}$$

同理 $$\left.\frac{\partial F}{\partial r}\right|_B = -\frac{1}{2A}[(F_2 - F_4)(x_3 - x_1) + (F_3 - F_1)(x_4 - x_2)]$$

已知Ⅰ，Ⅱ，Ⅲ，Ⅳ格点坐标及格心①，②，③，④的 F 值及面积. 求格点 jK 上的偏导数(图 4-6-4).

在四边形ⅠⅡⅢⅣ上由(4-6-13)式得

$$\oint_{\text{I II III IV}} F\boldsymbol{n}\cdot i\mathrm{d}s = \int_{\text{I II}} F\mathrm{d}r + \int_{\text{II III}} F\mathrm{d}r + \int_{\text{III IV}} F\mathrm{d}r + \int_{\text{IV I}} F\mathrm{d}r$$

$$\left.\frac{\partial F}{\partial x}\right|_{jk} = \frac{1}{2A}[F_{①}(r_{\text{II}} - r_{\text{I}}) + F_{②}(r_{\text{IV}} - r_{\text{II}}) + F_{③}(r_{\text{I}} - r_{\text{IV}}) + F_{④}(r_{\text{I}} - r_{\text{I}})] \tag{4-6-23}$$

$$\left.\frac{\partial F}{\partial r}\right|_{jk} = \frac{1}{2A}[F_{①}(x_{\text{II}} - x_{\text{I}}) + F_{②}(x_{\text{IV}} - x_{\text{II}}) + F_{③}(x_{\text{I}} - x_{\text{IV}}) + F_{④}(x_{\text{I}} - x_{\text{I}})]$$

式中　$2A = \frac{1}{2}(A_{①} + A_{②} + A_{③} + A_{④})$

(3) 四边形面积计算，见图 4-6-5，将四边形分为二个三角形 Δ124 和 Δ234 计算面积

$$A_b = \frac{1}{2}\boldsymbol{r}_{12} \times \boldsymbol{r}_{14} = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{r} & \boldsymbol{\theta} \\ x_2 - x_1 & r_2 - r_1 & 0 \\ x_4 - x_1 & r_4 - r_1 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\Delta 124 = A_b = |\boldsymbol{A}_b| = \frac{1}{2}[(x_2 - x_1)(r_4 - r_1)$$

$$-(x_4-x_1)(r_2-r_1)] \tag{4-6-24}$$

夹角按右手定则，逆时针为正，同理

$$\Delta 342=A_a=\frac{1}{2}[(x_4-x_3)(r_2-r_3)-(x_2-x_3)(r_4-r_3)]$$

$$A=A_b+A_a=\frac{1}{2}[(x_2-x_4)(r_3-r_1)+(x_1-x_3)(r_2-r_4)]$$

(4) 四边形绕轴旋转成的体积，由 A_a 得体积 V_a，由 A_b 得体积 V_b，对于 A_a 取平均半径为 $\frac{1}{3}(r_1+r_2+r_3)$ 则

$$V_a=2\pi\cdot\frac{1}{3}(r_2+r_3+r_4)A_a$$

同理 $$V_b=\frac{2\pi}{3}(r_1+r_2+r_4)A_b \tag{4-6-25}$$

(5) 质量守恒，取图 4-6-5 中网格 1234 是 ⓘ 格，由于是拉氏计算，网格内的质量 $M_{ⓘ}$ 不随时间而变。

$$M_{ⓘ}^n=M_{ⓘ}^0=\frac{1}{3}\left(\frac{\rho}{V}\right)_{ⓘ}^0[(r_2+r_3+r_4)A_a+(r_1+r_2+r_4)A_b]_{ⓘ}^0 \tag{4-6-26}$$

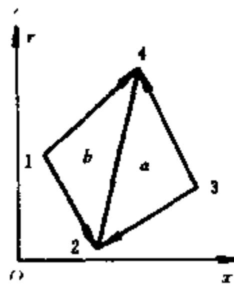


图 4-6-5 求四边形面积

(6) 运动方程，由图 4-6-4 已知格心①，②，③，④点的 σ_x，σ_r，σ_θ，τ 和坐标及 I，II，III，IV 格点坐标，求 jK 点 $t=t^{n+\frac{1}{2}}$ 时刻的速度，方程在四边形 I II III IV 上作差分。x 方向由(4-6-2)式得

$$\ddot{x}_{jk}^n=\frac{1}{\Delta t^n}(\dot{x}^{n+\frac{1}{2}}-\dot{x}^{n-\frac{1}{2}})_{j,k}=\frac{1}{\rho_{jk}^n}\left(\frac{\partial\sigma_x}{\partial x}+\frac{\partial\tau}{\partial r}+\frac{\tau}{r}\right)_{j,k}^n \tag{4-6-27}$$

$$\Delta t^n=\frac{1}{2}\left(\Delta t^{n+\frac{1}{2}}+\Delta t^{n-\frac{1}{2}}\right)=\frac{1}{2}(t^{n+1}-t^{n-1})$$

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial\sigma_x}{\partial x}=\frac{1}{\rho}\lim_{A\to 0}\frac{\oint_{\text{I II III IV}}\sigma_x dr}{2A}\doteq\frac{\oint_{\text{I II III IV}}\sigma_x dr}{2\rho A} \tag{4-6-28}$$

$$2A=\frac{1}{2}(A_{①}+A_{②}+A_{③}+A_{④})$$

$$(\rho A)_{jk}^n=\left(\frac{\rho^0}{V}A\right)_{jk}^n=\frac{\rho^0}{4}\left[\left(\frac{A}{V}\right)_{①}^n+\left(\frac{A}{V}\right)_{②}^n+\left(\frac{A}{V}\right)_{③}^n+\left(\frac{A}{V}\right)_{④}^n\right]$$

$$=\frac{\rho^0}{4}(\phi)_{jk}^n \tag{4-6-29}$$

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\sigma_x}{\partial x}\right)_{jk}^n=\frac{2}{\rho^0(\phi)_{jk}^n}[\sigma_{x①}(r_{\text{II}}-r_{\text{I}})+\sigma_{x②}(r_{\text{IV}}-r_{\text{II}})+\sigma_{x③}(r_{\text{I}}-r_{\text{IV}})+\sigma_{x④}(r_{\text{I}}-r_{\text{I}})]^n \tag{4-6-30}$$

同理 $$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\tau}{\partial r}\right)_{jk}^n=\frac{-2}{\rho^0(\phi)_{jk}^n}[\tau_{①}(x_{\text{II}}-x_{\text{I}})+\tau_{②}(x_{\text{IV}}-x_{\text{II}})+\tau_{③}(x_{\text{I}}-x_{\text{IV}})+\tau_{④}(x_{\text{I}}-x_{\text{I}})]^n \tag{4-6-31}$$

至于 $\left(\frac{\tau}{\rho r}\right)_{jk}^n$ 可由四个格心值平均得到，圆环①的质量 $M_{①}$

$$M_{①} = \rho_{①} r_{①} A_{①}$$

则 $$\left(\frac{1}{\rho r}\right)_{①}^{n} = \left(\frac{A}{M}\right)_{①}^{n} \tag{4-6-32}$$

所以 $$\left(\frac{\tau}{\rho r}\right)_{jk}^{n} = \frac{1}{4}\left[\left(\frac{\tau A}{M}\right)_{①} + \left(\frac{\tau A}{M}\right)_{②} + \left(\frac{\tau A}{M}\right)_{③} + \left(\frac{\tau A}{M}\right)_{④}\right]^{n} \tag{4-6-33}$$

$$\dot{x}_{jk}^{n+\frac{1}{2}} = \dot{x}_{jk}^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t^{n}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial \tau}{\partial r} + \frac{\tau}{\rho r}\right]_{jk}^{n} \tag{4-6-34}$$

同理 $$\dot{r}_{jk}^{n+\frac{1}{2}} = \dot{r}_{jk}^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t^{n}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial \tau}{\partial x} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{\rho r}\right)_{jk}^{n} \tag{4-6-35}$$

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial \sigma_r}{\partial r}\right)_{jk}^{n} = \frac{-2}{\rho^0(\phi)_{jk}^{n}}[\sigma_{r①}(x_{Ⅱ} - x_{Ⅰ}) + \sigma_{r②}(x_{Ⅳ} - x_{Ⅱ}) + \sigma_{r③}(x_{Ⅰ} - x_{Ⅲ}) + \sigma_{r④}(x_{Ⅰ} - x_{Ⅰ})] \tag{4-6-36}$$

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial \tau}{\partial x}\right)_{jk}^{n} = \frac{2}{\rho^0(\phi)_{jk}^{n}}[\tau_{①}(r_{Ⅱ} - r_{Ⅰ}) + \tau_{②}(r_{Ⅳ} - r_{Ⅱ}) + \tau_{③}(r_{Ⅰ} - r_{Ⅳ}) + \tau_{④}(r_{Ⅰ} - r_{Ⅰ})] \tag{4-6-37}$$

$$\left(\frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{\rho r}\right)_{jk}^{n} = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4}\left(A\frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{M}\right)_{①}^{n} \tag{4-6-38}$$

(7) 各网格点坐标

$$\Delta t^{n+\frac{1}{2}} = t^{n+1} - t^{n}$$

$$x_{jk}^{n+1} = x_{jk}^{n} + \dot{x}_{jk}^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}} \tag{4-6-39}$$

$$r_{jk}^{n+1} = r_{jk}^{n} + \dot{r}_{jk}^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}} \tag{4-6-40}$$

面积 $$A_{①}^{n+1} = \frac{1}{2}[(x_2 - x_4)(r_3 - r_1) + (x_1 - x_3)(r_2 - r_4)]^{n+1} \tag{4-6-41}$$

比容 $$V_{①}^{n+1} = \frac{\rho_{①}^{0}}{3M_{①}}[(r_2 + r_3 + r_4)A_a + (r_1 + r_2 + r_4)A_b]^{n+1} \tag{4-6-42}$$

人工粘性

$$q_{①}^{n+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \left[\dfrac{c_0{}^2\rho^0 A^{n+\frac{1}{2}}}{V^{n+\frac{1}{2}}}\left(\dfrac{\dot{V}^2}{V^2}\right)^{n+\frac{1}{2}}\right]_{①} & \text{当 } \dot{V} < 0 \\ 0 & \text{当 } \dot{V} \geqslant 0 \end{cases} \tag{4-6-43}$$

式中 $\dot{V}_{①}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t^{n+\frac{1}{2}}}(V_{①}^{n+1} - V_{①}^{n})$，其余 $n + \frac{1}{2}$ 值取算术平均值.

(8) 应力偏量，由(4-6-7)式得

$$\begin{bmatrix} S_x \\ S_r \\ S_\theta \\ \tau \end{bmatrix}_{①}^{n+1} = \begin{bmatrix} S_x \\ S_r \\ S_\theta \\ \tau \end{bmatrix}_{①}^{n} + 2\mu\Delta t^{n+\frac{1}{2}}\begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_x - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V} \\ \dot{\varepsilon}_r - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V} \\ \dot{\varepsilon}_\theta - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V} \\ \dot{\varepsilon}_{xr} \end{bmatrix}_{①}^{n+\frac{1}{2}} + \begin{bmatrix} \Delta\delta_x \\ \Delta\delta_r \\ 0 \\ \Delta\delta_{xr} \end{bmatrix}_{①}^{n} \tag{4-6-44}$$

$$(\dot{\varepsilon}_x)_{①}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{\partial \dot{x}}{\partial x}\right)_{①}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2A^{n+\frac{1}{2}}}[(\dot{x}_2 - \dot{x}_4)(r_3 - r_1) - (\dot{x}_3 - \dot{x}_1)(r_2 - r_4)]^{n+\frac{1}{2}}$$

$$(\dot{\varepsilon}_r)_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{\partial \dot{r}}{\partial r}\right)_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{-1}{2A^{n+\frac{1}{2}}}[(\dot{r}_2 - \dot{r}_4)(x_3 - x_1) - (\dot{r}_3 - \dot{r}_1)(x_2 - x_4)]^{n+\frac{1}{2}}$$

$$(\dot{\varepsilon}_\theta)_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{\dot{V}}{V} - \dot{\varepsilon}_x - \dot{\varepsilon}_r\right)_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}},$$

$$(\dot{\varepsilon}_{xr})_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \dot{r}}{\partial x} + \frac{\partial \dot{x}}{\partial r}\right)_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4A_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}}}[(\dot{r}_2 - \dot{r}_4)(r_3 - r_1) - (\dot{r}_3 - \dot{r}_1)(r_2 - r_4)$$

$$- (\dot{x}_2 - \dot{x}_4)(x_3 - x_1) + (\dot{x}_3 - \dot{x}_1)(x_2 - x_4)]^{n+\frac{1}{2}}$$

$$(\Delta\delta_x)_{\textcircled{i}}^n = \left[\frac{S_x^n - S_r^n}{2}\left(\cos 2\Delta\alpha^{n+\frac{1}{2}} - 1\right) - \tau^n \sin 2\Delta\alpha^{n+\frac{1}{2}}\right]_{\textcircled{i}}$$

$$(\Delta\delta_r)_{\textcircled{i}}^n = -(\Delta\delta_x)_{\textcircled{i}}^n$$

$$(\Delta\delta_{xr})_{\textcircled{i}}^n = \left[\tau^n\left(\cos 2\Delta\alpha^{n+\frac{1}{2}} - 1\right) + \frac{S_x^n - S_r^n}{2}\sin 2\Delta\alpha^{n+\frac{1}{2}}\right]_{\textcircled{i}}$$

$$2(\Delta\alpha)_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{\partial \dot{r}}{\partial x} - \frac{\partial \dot{x}}{\partial r}\right)_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}} \Delta t^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t^{n+\frac{1}{2}}}{2A_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}}}[(\dot{r}_2 - \dot{r}_4)(r_3 - r_1) - (r_2 - r_4)(\dot{r}_3 - \dot{r}_1)$$

$$+ (\dot{x}_2 - \dot{x}_4)(x_3 - x_1) - (x_2 - x_4)(\dot{x}_3 - \dot{x}_1)]^{n+\frac{1}{2}}$$

(9) 屈服条件

$$(J_2)_{\textcircled{i}}^{n+1} = (\tau^2 - S_r S_\theta - S_\theta S_x - S_x S_r)_{\textcircled{i}}^{n+1} \tag{4-6-45}$$

$$K_{\textcircled{i}}^{n+1} = \begin{cases} \dfrac{Y_s}{\sqrt{3(J_2)_{\textcircled{i}}^{n+1}}} & (J_2)_{\textcircled{i}}^{n+1} > \dfrac{1}{3}Y_s^2 \\ 1 & \leqslant \dfrac{1}{3}Y_s^2 \end{cases} \tag{4-6-46}$$

$$(S_x, S_r, S_\theta, \tau)^T K_{\textcircled{i}}^{n+1} \longrightarrow (S_x, S_r, S_\theta, \tau)^T \tag{4-6-47}$$

(10) 能量方程，由(4-6-4)式在 $t^{n+\frac{1}{2}}$ 时刻在 $A_{\textcircled{i}}$ 上作差分

$$e_{\textcircled{i}}^{n+1} = \left\{\frac{e^n - \left[\frac{1}{2}(A^{*n+1} + P^n) + q^{n+\frac{1}{2}}\right](V^{n+1} - V^n) + \Delta Z^{n+\frac{1}{2}}}{\rho^0 + \frac{1}{2}\cdot\frac{d}{V^{n+1}}(V^{n+1} - V^n)}\right\}_{\textcircled{i}} \tag{4-6-48}$$

$$A^{*n+1} = \left[a\left(\frac{1}{V} - 1\right) + b\left(\frac{1}{V} - 1\right)^2 + c\left(\frac{1}{V} - 1\right)^3\right]_{\textcircled{i}}^{n+1}$$

$$\Delta Z_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}} = \Delta t^{n+\frac{1}{2}}[V(S_x\dot{\varepsilon}_x + S_r\dot{\varepsilon}_r + S_\theta\dot{\varepsilon}_r + 2\tau\dot{\varepsilon}_{xr})]_{\textcircled{i}}^{n+\frac{1}{2}}$$

(11)状态方程 $P_{\textcircled{i}}^{n+1} = A^{*n+1} + \dfrac{d}{V_{\textcircled{i}}^{n+1}} e_{\textcircled{i}}^{n+1}$ (4-6-49)

应力张量分量

$$\begin{bmatrix}\sigma_x \\ \sigma_r \\ \sigma_\theta\end{bmatrix}_{\textcircled{i}}^{n+1} = \begin{bmatrix}S_x \\ S_r \\ S_\theta\end{bmatrix}_{\textcircled{i}}^{n+1} - (P^{n+1} + q^{n+\frac{1}{2}})_{\textcircled{i}} \tag{4-6-50}$$

(12) 稳定性条件

$$\Delta t^{n+\frac{3}{2}} = \min_{\textcircled{i}}\left(\frac{A^{n+1}}{3r_{\max}^{n+1}\sqrt{a^2 + b^2}}\right)_{\textcircled{i}} \tag{4-6-51}$$

式中 $r_{\max}$ 是面积 A 中两条对角线的大者，a 为局部音速，

$$b = \begin{cases} 2c_0\left(\dfrac{A^{n+1}\dot{V}^{n+\frac{1}{2}}}{r_{\max}^{n+1}V^{n+\frac{1}{2}}}\right)_{①} & \dot{V} < 0 \\ 0 & \dot{V} \geqslant 0 \end{cases} \tag{4-6-52}$$

4.6.4　边界条件

不同条件的边界格有不同的差分格式，为了实现回路积分形式的离散，在边界格外面要设置一排虚拟网格.

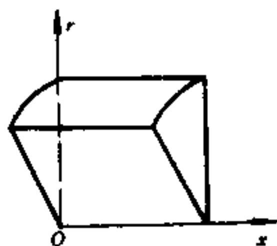


图 4-6-6　对称轴线处的网格

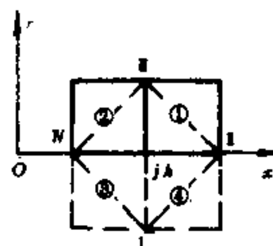


图 4-6-7　对称轴线处的虚拟网格

(1)对称轴线处网格(图 4-6-6)，其守恒方程的形式和普通网格不同.

$$\frac{\dot{V}}{V} = \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} + 2\frac{\partial \dot{r}}{\partial r} \tag{4-6-53}$$

$$\rho\ddot{x} = \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + 2\frac{\partial \tau}{\partial r} \tag{4-6-54}$$

$$\rho\ddot{r} = 2\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\partial \tau}{\partial x} - 2\frac{\sigma_\theta}{r} \tag{4-6-55}$$

$$\rho^0\dot{e} = -(P+q)\dot{V} + V\left[S_x\frac{\partial \dot{x}}{\partial x} + (S_r + S_\theta)\frac{\partial \dot{r}}{\partial r} + \tau\left(\frac{\partial \dot{x}}{\partial r} + \frac{\partial \dot{r}}{\partial x}\right)\right] \tag{4-6-56}$$

差分格式如下，见图 4-6-7

$$\ddot{x} = \frac{1}{\Delta t^n}(\dot{x}^{n+\frac{1}{2}} - \dot{x}^{n-\frac{1}{2}})_{jk}$$

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial \sigma_x}{\partial x}\right)^n_{jk} = \frac{1}{(\rho 2A)^n_{jk}}\oint_{\mathrm{I\,II\,III\,N}} \sigma_x dr$$

虚拟格按照镜像对称原则设立，

$$(\rho 2A)^n_{jk} = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4}(\rho A)^n_{ⓘ} = \left(\frac{\rho^0 A}{V}\right)^n_{①} + \left(\frac{\rho^0 A}{V}\right)^n_{②}$$

$$\begin{aligned}\oint \sigma_x dr &= \sigma_{x①}(r_{\mathrm{II}} - r_{\mathrm{I}}) + \sigma_{x②}(r_N - r_{\mathrm{II}}) \\ &\quad + \sigma_{x②}(-r_{\mathrm{I}} - r_N) + \sigma_{x①}(r_{\mathrm{I}} - r_{\mathrm{II}}) \\ &= 2r_{\mathrm{II}}(\sigma_{x①} - \sigma_{x②})\end{aligned}$$

$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial \sigma_{rx}}{\partial r}\right)^n_{jk} = \frac{1}{(\rho 2A)^n_{jk}}\oint \sigma_{rx} dx$$

$$=\frac{2}{(\rho 2A)_{jk}^{n}}[\sigma_{rx①}(x_{\mathrm{I}}-x_{\mathrm{II}})+\sigma_{rx②}(x_{\mathrm{II}}-x_{\mathrm{N}})]^{n}$$

(4-6-54)式的差分方程为

$$\dot{x}_{jk}^{n+\frac{1}{2}}=\dot{x}_{jk}^{n-\frac{1}{2}}+\frac{2\Delta t}{\left(\frac{\rho^{0}A}{V}\right)_{①}^{n}+\left(\frac{\rho^{0}A}{V}\right)_{②}^{n}}[r_{\mathrm{II}}(\sigma_{x①}-\sigma_{x②})+\sigma_{rx①}(x_{\mathrm{I}}-x_{\mathrm{II}})+\sigma_{rx②}(x_{\mathrm{II}}-x_{\mathrm{N}})]^{n} \tag{4-6-57}$$

因 jk 点在对称轴线上，显然 $\dot{r}_{jk}=0$.

若 r 轴为固定边界（图 4-6-8），情况和图 4-6-7 类似，但是差分方程不同，虚拟格参量按对 r 轴镜面反射原则确定.

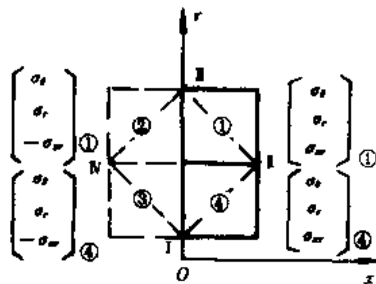


图 4-6-8　固定边界处的虚拟网格

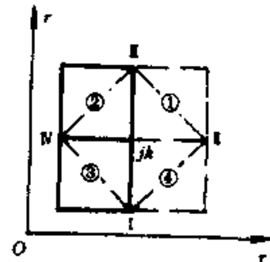


图 4-6-9　自由边界处的虚拟网格

(2) 自由边界格，②和③格右边为真空（图 4-6-9），则可设虚拟格①，④，格中密度、质量和应力分量均为 0，jk 点成为内格，它的运动方程在面积 I II III IV 上作回路积分得

$$\dot{x}_{jk}^{n+\frac{1}{2}}=\dot{x}_{jk}^{n-\frac{1}{2}}+\frac{\Delta t^{n}}{2\phi_{jk}^{n}}[\sigma_{x②}(r_{\mathrm{II}}-r_{\mathrm{N}})+\sigma_{x③}(r_{\mathrm{N}}-r_{\mathrm{I}})-\sigma_{xr②}(x_{\mathrm{II}}-x_{\mathrm{N}})-\sigma_{xr③}(x_{\mathrm{N}}-x_{\mathrm{I}})]^{n}$$
$$+\Delta t^{n}\frac{1}{2}\left[\left(\sigma_{xr}\frac{A}{M}\right)_{②}^{n}+\left(\sigma_{xr}\frac{A}{M}\right)_{③}^{n}\right] \tag{4-6-58}$$

$$\dot{r}_{jk}^{n+\frac{1}{2}}=\dot{r}_{jk}^{n-\frac{1}{2}}+\frac{\Delta t^{n}}{2\phi_{jk}^{n}}[\sigma_{r②}(x_{\mathrm{II}}-x_{\mathrm{N}})+\sigma_{r③}(x_{\mathrm{N}}-x_{\mathrm{I}})-\sigma_{xr②}(r_{\mathrm{II}}-r_{\mathrm{N}})-\sigma_{xr③}(r_{\mathrm{N}}-r_{\mathrm{I}})]^{n}$$
$$+\frac{\Delta t^{n}}{2}\left\{\left[(\sigma_{r}-\sigma_{\theta})\frac{A}{M}\right]_{②}^{n}+\left[(\sigma_{r}-\sigma_{\theta})\frac{A}{M}\right]_{③}^{n}\right\} \tag{4-6-59}$$

其它如拐角格，可能两个方向均为自由边界，也可能一个方向自由边界，另一个方向是固定边界，均可以相应地建立差分格式.

4.6.5　滑动边界

两种材料的内界面，在许多情况下会产生切向滑动，即在界面上同一点，两种材料的速度沿界面的切向速度分量不相等，法向速度分量相等，这就是滑动边界. 在 HEMP 程序中，能够处理流体——流体和流体——弹塑性的滑动边界. 计算过程分 4 步进行（见图 4-6-10）.

(1) 重物质界面不动，当作刚性壁，轻物质（作为流体）界面一点 f^{n} 在此刚性壁上滑动，经

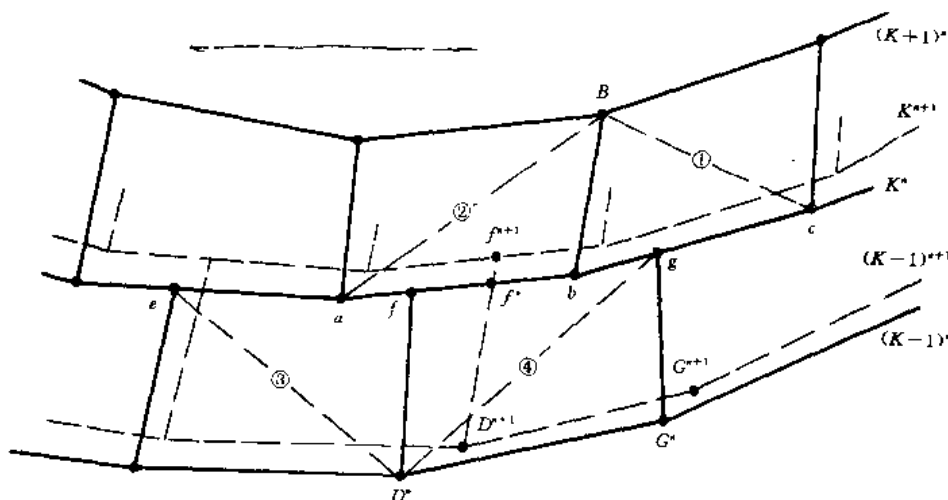


图 4-6-10　滑动边界网格与符号

过 Δt 到达 f^*；

(2) 界面 K 线，在流体作用下运动，重物质网格点 a^n, b^n 运动到 a^{n+1}, b^{n+1}；

(3) 计算界面下面一排轻物质网格 $K-1$ 线上的格点 D^n, G^n 运动到 D^{n+1}, G^{n+1}；

(4) 作 $D^{n+1}f^*$ 连线延长交 K^{n+1} 线于 f^{n+1} 点，该点就是轻物质界面 f^n 点在 $n+1$ 时刻的坐标.

依次把各点求出，即得到 $n+1$ 时刻的滑移线，详细计算分述于下.

(1) 求 $f^*(x^*, r^*)$，在 $\Delta t^{n+\frac{1}{2}} = t^{n+1} - t^n$ 期间，重物质界面不动，轻物质作为流体的应力张量为

$$\begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & \sigma \end{bmatrix}, \sigma = -(P+q)$$

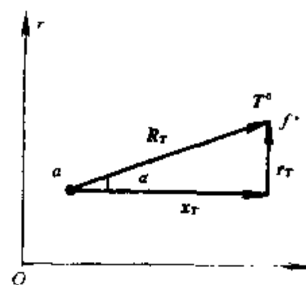


图 4-6-11　求 f^* 计算图

f 点在 ab 线上滑动，ab 方向单位向量 $\boldsymbol{T}^0$(图 4-6-11)，流体运动方程为

$$\begin{aligned} \rho \ddot{x} &= \frac{\partial \sigma}{\partial x} \\ \rho \ddot{r} &= \frac{\partial \sigma}{\partial r} \end{aligned} \tag{4-6-60}$$

f^n 的位移向量为 $\boldsymbol{R}_T$，则

$$\rho \ddot{R}_T = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x}\cos\alpha + \frac{\partial \sigma}{\partial r}\sin\alpha\right)\boldsymbol{T}^0 = G\boldsymbol{T}^0 \tag{4-6-61}$$

$$\begin{cases}\cos\alpha = \dfrac{x_b - x_a}{ab} \\ \sin\alpha = \dfrac{r_b - r_a}{ab}\end{cases} \quad ab = [(x_b - x_a)^2 + (r_b - r_a)^2]^{\frac{1}{2}} \tag{4-6-62}$$

$$\begin{cases}\rho\ddot{x}_T = G\cos\alpha \\ \rho\ddot{r}_T = G\sin\alpha\end{cases} \tag{4-6-63}$$

设图 4-6-10 eg 为直线，方程(4-6-63)式在三角形$(Dge)^n$上作差分离散，得到的$\dot{x}$和$\dot{r}$本来是三角形面心的值，现近似作为f^n的值.

$$G = \frac{1}{A}\left(\oint\sigma dr \cdot \cos\alpha + \oint\sigma dx \cdot \sin\alpha\right)$$

$$= \frac{1}{A}\left\{\left[\sigma_{③}(r_D - r_e) + \sigma_{①}(r_g - r_D) + \frac{1}{2}(\sigma_{③} + \sigma_{①})(r_e - r_g)\right]\cos\alpha - \left[\sigma_{③}(x_D - x_e) + \sigma_{①}(x_g - x_D) + \frac{1}{2}(\sigma_{③} + \sigma_{①})(x_e - x_g)\right]\sin\alpha\right\}$$

其中 $\frac{1}{2}(\sigma_{③} + \sigma_{①})\frac{1}{ab}[(r_e - r_g)(x_b - x_a) - (x_e - x_g)(r_b - r_a)] \approx 0$

A 为三角形$(Dge)^n$面积，得

$$G_f = AG = [\sigma_{③}(r_D - r_e) + \sigma_{①}(r_g - r_D)]\cos\alpha - [\sigma_{③}(x_D - x_e) + \sigma_{①}(x_g - x_D)]\sin\alpha$$

则(4-6-63)式的差分格式为

$$\begin{aligned}\dot{x}_f^{n+\frac{1}{2}} &= \dot{x}_f^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^n}{2\phi_f^n}G_f^n\cos\alpha \\ \dot{r}_f^{n+\frac{1}{2}} &= \dot{r}_f^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^n}{2\phi_f^n}G_f^n\sin\alpha \\ \phi_f^n &= \frac{1}{4}\left[\left(\frac{\rho^0 A}{V}\right)_{③}^n + \left(\frac{\rho^0 A}{V}\right)_{①}^n\right]\end{aligned} \tag{4-6-64}$$

f^*坐标x^*,r^*为

$$\begin{aligned}x^* &= x_f^n + \dot{x}_f^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}} \\ r^* &= r_f^n + \dot{r}_f^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}}\end{aligned} \tag{4-6-65}$$

(2) 界面上重物质网格点的运动，以 b 点为例，运动方程为

$$\begin{cases}\rho\dot{x} = \dfrac{\partial\sigma_x}{\partial x} + \dfrac{\partial\tau}{\partial r} + \dfrac{\tau}{r} \\ \rho\dot{r} = \dfrac{\partial\sigma_r}{\partial r} + \dfrac{\partial\tau}{\partial x} + \dfrac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r}\end{cases} \tag{4-6-66}$$

在面元 $abcB$(图 4-6-10)上作差分，把面心的结果近似作为 b 点值.

① 过网格①中心 Z 点作 bc 的垂线，交 $K-\frac{1}{2}$ 线(即网格中心联线)于 e 点(图 4-6-12)，同样过②格中心 Q 点作 ab 垂线交 $K-1$ 线于 d 点，现需要判断 e 点和 d 点在那一段网格中心联线上，令 R、S 和 T 为轻物质界面网格心，分别作 ZR、ZS 和 ZT，与 x 轴夹角为 β_1,β_2,β_3

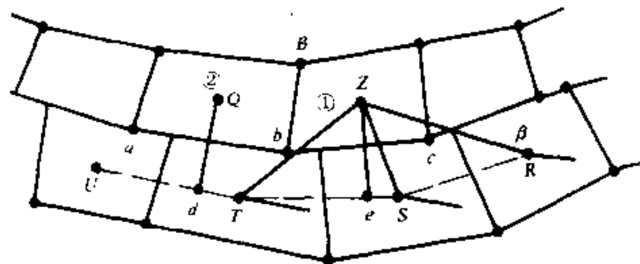


图 4-6-12 交点 e 和 d 的确定

等，Ze 和 x 轴夹角为 ϕ，取

$$\mathrm{tg}\theta_i = \mathrm{tg}(\phi - \beta_i) \quad i = 1,2,3\cdots$$

若 $\mathrm{tg}\theta$ 正负变号，则交点在相应变号的两网格心的联线上，例如 Q 点，当 $i=1,2,3$ 时分别为 $-,-,+$. 则交点 e 在 ST 联线上，同理求 d 和其它交点. 下面以 d 为例求 x_d, r_d. 设 d 点在 $U(x_U, r_U)$ 和 $T(x_T, r_T)$ 联结线上，Q 坐标为 (x_2, r_2)，Qd 的斜率 m_2，UT 的斜率 m_{UT}

$$m_2 = -\frac{x_b - x_a}{r_b - r_a}, \qquad m_{UT} = \frac{r_T - r_U}{x_T - x_U}$$

$$\begin{cases} x_d = \dfrac{m_{UT}x_U - m_2 x_2 + r_2 - r_U}{m_{UT} - m_2} \\ r_d = \dfrac{m_2[r_U - m_{UT}(x_U - x_2)] - m_{UT}r_2}{m_2 - m_{UT}} \end{cases} \tag{4-6-67}$$

② 求 d 和 e 点应力，d 点应力 σ_d 由相应格心应力 σ_U 和 σ_T 线性插值求得，取图 4-6-12 中 dT 为 l_1，Ud 为 l_2，则：

$$\begin{aligned} l_1 &= [(x_T - x_d)^2 + (r_T - r_d)^2]^{1/2} \\ l_2 &= [(x_d - x_U)^2 + (r_D - r_U)^2]^{1/2} \end{aligned} \tag{4-6-68}$$

$$\sigma_d = \frac{\sigma_U l_1 + \sigma_T l_2}{l_1 + l_2} \tag{4-6-69}$$

将 σ_d 看作 ab 上的平均应力，σ_e 看作 bc 上的平均应力

③ 求 $b(x_b, r_b)^{n+1}$，(4-6-66) 式在 $abcB$ 上作差分，

$$\begin{cases} \dot{x}_b^{n+\frac{1}{2}} = \dot{x}_b^{n-\frac{1}{2}} + \dfrac{\Delta t^n}{2\phi_b^n}\left(\oint_c \sigma_x{}^n \mathrm{d}r - \oint_c \tau^n \mathrm{d}x\right) + \dfrac{\Delta t^n}{2}\left[\left(\dfrac{\tau A}{M}\right)_①^n + \left(\dfrac{\tau A}{M}\right)_②^n\right] \\ \dot{r}_b^{n+\frac{1}{2}} = \dot{r}_b^{n-\frac{1}{2}} - \dfrac{\Delta t^n}{2\phi_b^n}\left(\oint_c \sigma_r^n \mathrm{d}x - \oint_c \tau^n \mathrm{d}r\right) + \dfrac{\Delta t^n}{2}\left\{\left[\dfrac{(\sigma_r - \sigma_\theta)A}{M}\right]_①^n + \left[\dfrac{(\sigma_r - \sigma_\theta)A}{M}\right]_②^n\right\} \end{cases} \tag{4-6-70}$$

$$\oint_c \sigma_x^n \mathrm{d}r = [\sigma_d(r_b - r_a) + \sigma_e(r_c - r_b) + \sigma_{x①}(r_B - r_c) + \sigma_{x②}(r_a - r_B)]^n$$

$$\oint_c \tau^n \mathrm{d}r = [\tau_①(r_B - r_c) + \tau_②(r_a - r_B)]^n$$

$$\oint_c \sigma_r^n \mathrm{d}x = [\sigma_d(x_b - x_a) + \sigma_e(x_c - x_b) + \sigma_{r①}(x_B - x_c) + \sigma_{r②}(x_a - x_B)]^n$$

$$\oint_c \tau^n \mathrm{d}x = [\tau_①(x_B - x_c) + \tau_②(x_a - x_B)]^n$$

$$M_① = (\rho A r)_①, \qquad M_② = (\rho A r)_②$$

$$\begin{cases} x_b^{n+1} = x_b^n + \dot{x}_b^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}} \\ r_b^{n+1} = r_b^n + \dot{r}_b^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{4-6-71}$$

(3) 计算 $(K-1)^{n+1}$ 线上网格点 D^{n+1} 和 G^{n+1} 等坐标，用通常的内格点计算公式(4-6-35)和(4-6-36) 式进行.

(4) 计算 K^{n+1} 线上流体点 $f^{n+1}(x_f, r_f)^{n+1}$，作 $D^{n+1}f^*$ 直线延长交 K^{n+1} 线于 f^{n+1} 点，判断 $D^{n+1}f^*$ 线与哪一个网格线相交.

取 $D^{n+1}f^*$ 与 x 轴夹角为 ϕ，D^{n+1} 与 c^{n+1}、b^{n+1}、a^{n+1} 等联线与 x 轴夹角为 $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ 等.

$$\mathrm{tg}\theta_i = \mathrm{tg}(\phi - \beta_i) \qquad i = 1,2,3,\cdots$$

当正负号改变时，f^{n+1} 就落在变号的网格线上，例如图 4-6-13 中 $i = 1,2,3$ 时，$\mathrm{tg}\theta_i$ 为 $+$，$+$，$-$，则 f^{n+1} 在 $a^{n+1}b^{n+1}$ 线上. f^{n+1} 坐标由下式求得

$$\begin{cases} x_f^{n+1} = \left(\dfrac{r_a - r_D + m_2 x_D - m_{ab} x_a}{m_2 - m_{ab}}\right)^{n+1} \\ r_f^{n+1} = \left\{\dfrac{m_D(r_a - m_{ab}(x_a - x_D) - m_{ab} r_D}{m_{ab} - m_D}\right\}^{n+1} \end{cases} \tag{4-6-72}$$

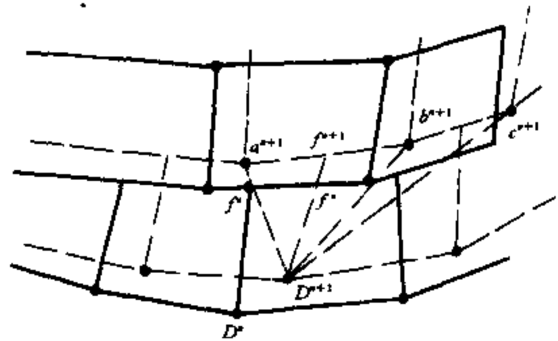


图 4-6-13　交点 f^{n+1} 的确定

$$\begin{aligned} \left(\frac{r_f - r_D}{x_f - x_D}\right)^{n+1} &= \left(\frac{r^* - r_D}{x^* - x_D}\right)^{n+1} = m_2^{n+1} \\ \left(\frac{r_f - r_a}{x_f - x_a}\right)^{n+1} &= \left(\frac{r_b - r_a}{x_b - x_a}\right)^{n+1} = m_{ab}{}^{n+1} \end{aligned} \tag{4-6-73}$$

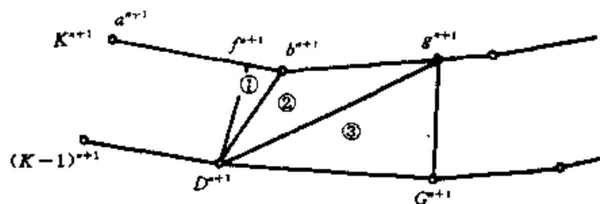


图 4-6-14　五边形面积的计算

(5) 计算界面下面一排流体网格中心 $\left(K - \frac{1}{2}\right)$ 的比容. 由于界面网格错开，不再是四边形而是五边形，如 $(DGgbf)^{n+1}$，可将五边形分为三个三角形（如图 4-6-14 所示）

$$A_{①}^{n+1} = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} i^0 & r^0 & \theta^0 \\ x_b - x_D & r_b - r_D & 0 \\ x_f - x_D & r_f - r_D & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{2}[(x_b - x_D)(r_f - r_D) - (x_f - x_D)(r_b - r_D)]^{n+1}$$

$$A_{②}^{n+1} = \frac{1}{2}[(x_g - x_D)(r_b - r_D) - (x_b - x_D)(r_g - r_D)]^{n+1}$$

$$A_{③}^{n+1} = \frac{1}{2}[(x_G - x_D)(r_g - r_D) - (x_g - x_D)(r_G - r_D)]^{n+1}$$

以 $A_{①}$，$A_{②}$，$A_{③}$ 为截面旋转得体积 $v_{①}$，$v_{②}$，$v_{③}$，半径取三个顶点的平均值.

总体积　$V_T^{n+1} = 2\pi(A_{①}r_{①} + A_{②}r_{②} + A_{③}r_{③})^{n+1}$

比容
$$V^{n+1} = \frac{\rho^0}{\dfrac{2\pi M}{V_T^{n+1}}} = \frac{\rho^0}{M}(A_{①}r_{①} + A_{②}r_{②} + A_{③}r_{③})^{n+1} \tag{4-6-74}$$

$$\begin{bmatrix} r_{①} \\ r_{②} \\ r_{③} \end{bmatrix}^{n+1} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} r_b + r_f + r_D \\ r_g + r_b + r_D \\ r_G + r_g + r_D \end{bmatrix}^{n-1} \tag{4-6-75}$$

流体没有偏应力，界面流体格子的其它量 p^{n-1}，q^{n+1}，e^{n+1}和弹塑性材料格子计算公式一样.

(6) 其它滑移处理方法

以上是 HEMP 程序中的正置滑移线计算. 如果重物质在下方，轻物质在上方，称为倒置滑移线，则要用另一套计算公式. 这种处理方法称为主从界面法，有的程序则不分主从界面，如 TOODY 程序和 C-HEMP 程序(Lynn Seaman, 1983).

以上计算的滑移线，在初始时刻就存在，不受任何条件影响，称为自由滑移线。还有一类"束缚滑移线"，满足一定条件时，才产生滑移，例如束缚点的八面体剪应力 τ_8 大于某值时解除束缚，或塑性变形大于某值时解除束缚. 还有一种方法是某点解除束缚后，以速度 u_0 值依次使其它滑移线点解除束缚，这些措施使得计算更接近实际情况.

4.6.6 重分网格

拉格朗日法允许任意四边形网格. 但是网格线愈偏离正交，计算误差愈大. 因此初始网格尽量使网格线正交，网格尺寸尽量均匀. 随着计算的进行，网格随着材料变形和扭曲，使计算误差增大，如果发生网格线交叉，就会出现负质量，如图 4-6-15 所示. 为了解决此问题，人们采取了各种措施. 一类是尽量延缓网格扭曲，加进各种形式的粘性项，其中较为有效的方法是采用三角网格，当三角形的一个角接近 180°时(以后才能穿越对边)，网格体积变得很小，密度加大，使得压力和人工粘性加大，阻止顶点向对边接近，从而避免网格交叉，但是这些措施可能使计算结果远离实际物理图像，因为一些过程实际上存在材料的扭曲和变形. 另一类方法是重分网格，以一定法则将变形的网格调整到较为整齐的形状，从面避免网格交叉，但是在重分网格过程中，必然要加进输运计算，也就是说采用了欧拉方法，使得计算不再是跟踪原来的网格点，而是跟踪重分后的新网格点，经过多次重分网格处理后，面目全非，计算图形已经不能对应初始网格了. 但是比较起来，还是重分网格得到了广泛的应用.

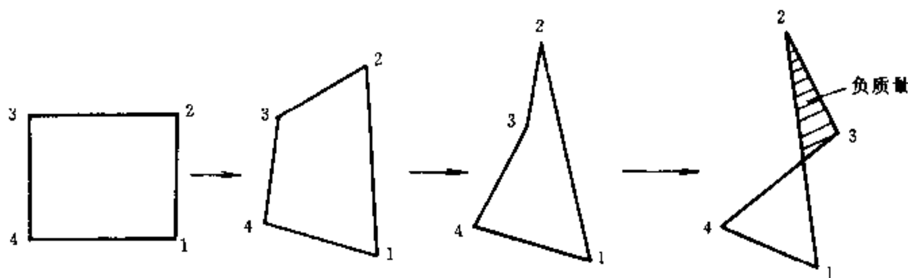


图 4-6-15　网格变形示意图

重分网格的方法很多.首先要确定对何种网格施行重分,例如检查网格四个顶角,如果有一个顶角度凹(即夹角大于180°),则对该点进行重分.其次是确定网格划分方法,原则是使新网格尽量正交和均匀.最后是通过输运计算,使新旧网格守恒,求出新网格的各物理量.下面介绍一种重分网格的方法.

见图4-6-16按照使角点0周转的四个网格角点尽量均匀的原则,来确定新角点0.在直线01,02,03,04方向上分别作单位向量,在以四个单位向量的合成方向上确定$\tilde{0}$点,并用01～04中最短线段作调整,0坐标为$(x_{\tilde{0}}, y_{\tilde{0}})$.

$$x_{\tilde{0}} = x_0 + \frac{\beta}{4}\min_i|\Delta x_{0i}|\sum_i \frac{\Delta x_{0i}}{|\Delta x_{0i}|}$$

$$\Delta x_{0i} = x_i - x_0,\ i = 1, 2, 3, 4 \qquad (4\text{-}6\text{-}76)$$

$$y_{\tilde{0}} = y_0 + \frac{\beta}{4}\min_i|\Delta y_{0i}|\sum_i \frac{\Delta y_{0i}}{|\Delta y_{0i}|}$$

$$\Delta y_{0i} = y_i - y_0,\ i = 1, 2, 3, 4$$

式中,β为调节系数.

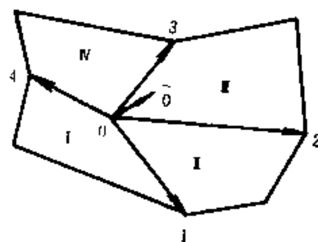


图4-6-16 重分网格确定新角点O示意图

新角点确定后,组成了新网格,于是一部分旧网格的体积携带质量、动量和能量划归新网格,各个新网格内部均匀化,形成新的物理量.设系统的边界上的输运已经给定,角点的计算依次进行,图4-6-17中$K-1$行以及K行上的$j-1$点已经计算完,现在要计算$\tilde{0}$引起的输运.

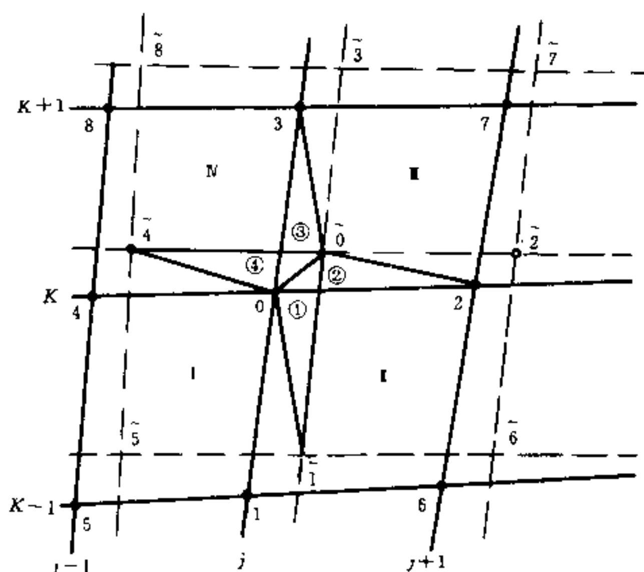


图4-6-17 确定0后的输运计算

设图4-6-17中三角形体积①,②,③,④分别为$V_1 = V_{0\tilde{0}1}$,$V_2 = V_{0\tilde{0}2}$,$V_3 = V_{0\tilde{0}3}$,$V_4 = V_{0\tilde{0}4}$,注意在此角标的次序若是逆时针,则体积为正;顺时针时,体积为负。四个三角形体积的

质量分别为

$$M_{i0}=\frac{1}{2}\left\{\begin{bmatrix}\rho_{\mathrm{I}}\\ \rho_{\mathrm{II}}\\ \rho_{\mathrm{III}}\\ \rho_{\mathrm{IV}}\end{bmatrix}(V_{i}+\beta|V_{i}|)+\begin{bmatrix}\rho_{1}\\ \rho_{2}\\ \rho_{\mathrm{IV}}\\ \rho_{1}\end{bmatrix}(V_{i}-\beta|V_{i}|)\right\} \tag{4-6-77}$$

$i=1,2,3,4$

式中 β 为可调参数，$\beta=1$ 为贡献网格法，$\beta=0$ 为中心差分.

每一个角点引起周围四个网格各输运一次，因此每个网格需经过四个角点，共四次输运才算完成，用上标“′”，“″”和“‴”分别表示一次，二次和三次输运后的量，图 4-6-18 表示网格 I 新旧体积的关系：

$$\tilde{V}_{\mathrm{I}}=V_{\mathrm{I}}+V_{1'}+V_{4'}-V_{2'}-V_{3'}-V_{1''}+V_{3''}-V_{1'''}+V_{2'''} \tag{4-6-78}$$

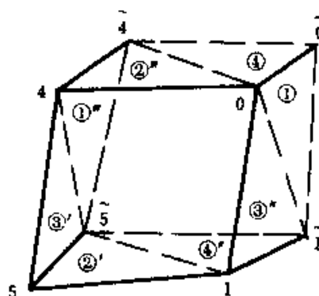


图 4-6-18 重分后网格 I 新旧体积的关系

由图 4-6-17 得

$$\begin{aligned}\tilde{M}_{\mathrm{I}}&=M'''_{\mathrm{I}}+M_{1'''}+M_{1}\\ M'''_{\mathrm{I}}&=M''_{\mathrm{I}}-M_{1''}+M_{2}\\ M''_{\mathrm{II}}&=M_{\mathrm{II}}-M_{2}-M_{3}\\ M''_{\mathrm{IV}}&=M_{\mathrm{IV}}-M_{3}+M_{4}\end{aligned} \tag{4-6-79}$$

由输运前后的动量守恒可得

$$\begin{aligned}&M'''_{\mathrm{I}}\cdot\frac{1}{4}(u_{0}+u_{1}+u_{5}+u_{4})+M''_{\mathrm{II}}\cdot\frac{1}{4}(u_{0}+u_{1}\\ &\quad+u_{6}+u_{2})+M_{\mathrm{III}}\cdot\frac{1}{4}(u_{0}+u_{2}+u_{7}+u_{3})\\ &\quad+M_{\mathrm{IV}}\cdot\frac{1}{4}(u_{0}+u_{3}+u_{8}+u_{4})\\ &=M_{\mathrm{I}}\cdot\frac{1}{4}(u_{0}+u_{1}+u_{5}+u_{4})+M'_{\mathrm{II}}\cdot\frac{1}{4}(u_{0}+u_{1}+u_{6}+u_{2})\\ &\quad+M_{\mathrm{III}}\cdot\frac{1}{4}(u_{0}+u_{2}+u_{7}+u_{3})\quad+M''_{\mathrm{IV}}\cdot\frac{1}{4}(u_{0}+u_{3}+u_{8}+u_{4})\end{aligned} \tag{4-6-80}$$

由上式可解得 u_{0}，同理可求出另一速度分量 v_{0}.

内能输运由下式给出

$$(Me)_{i0}=\frac{1}{2}\left\{\begin{bmatrix}(\rho e)_{\mathrm{I}}\\ (\rho e)_{\mathrm{II}}\\ (\rho e)_{\mathrm{III}}\\ (\rho e)_{\mathrm{IV}}\end{bmatrix}(V_{i}+\beta|V_{i}|)+\begin{bmatrix}(\rho e)_{1}\\ (\rho e)_{2}\\ (\rho e)_{\mathrm{IV}}\\ (\rho e)_{1}\end{bmatrix}(V_{i}-\beta|V_{i}|)\right\} \tag{4-6-81}$$

$i=1,2,3,4$

$$
\begin{aligned}
\tilde{e}_1 &= \frac{1}{\tilde{M}_1}\left[(Me)_1^* + (Me)_1 + (Me)_L\right] \\
e_{\mathrm{I}}^* &= \frac{1}{M_{\mathrm{I}}^*}\left[(Me)_{\mathrm{I}}^* + (Me)_1 + (Me)_2\right] \\
e_{\mathrm{II}}^* &= \frac{1}{M_{\mathrm{II}}^*}\left[(Me)_{\mathrm{II}}^* + (Me)_2 + (Me)_3\right] \\
e_{\mathrm{N}}^* &= \frac{1}{M_{\mathrm{N}}^*}\left[(Me)_{\mathrm{N}}^* + (Me)_L + (Me)_3\right]
\end{aligned}
\tag{4-6-82}
$$

新网格密度

$$\rho_1 = \frac{\tilde{M}_1}{\tilde{V}_1} \tag{4-6-83}$$

新网格压力，由状态方程得

$$\tilde{P}_1 = P(\rho_1, \tilde{e}_1) \tag{4-6-84}$$

至此计算完毕. 可以证明，用上述方法计算输运，可以保证整个计算域中，质量、动量和内能在输运前后保持不变. 但是总动能不能保持不变，这就是输运所引起的误差.

对于一些大型拉氏程序，有专门的自动重分网格子程序，或者采用人机对话方式，在荧光屏上直接调整修改网格图形，以进行重分网格. 总之，重分网格是拉氏程序中的一个重要子程序.

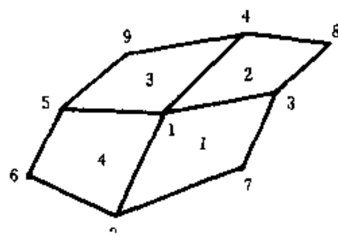
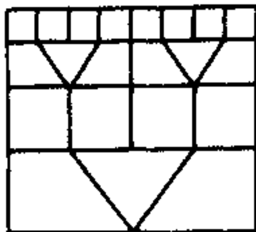
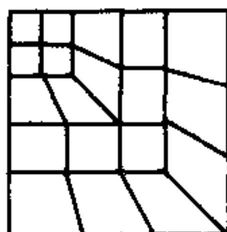


图 4-6-19　有限元编号

4.6.7　初始网格划分

从网格编号来看，通常用 ij 编号，用两簇线来划分网格，给出 i 和 j 的值就可以确定网格号，欧拉程序和一部分拉氏程序，如 HEMP 程序采用这种编号. 还有一种有限元编号，如图 4-6-19 所示，分网格号和节点号两种，要三套数据：① 围绕网格的节点，如绕网格 3 的节点 1,4,9,5；② 围绕节点的网格，如绕节点 1 的网格 1,2,3,4；③ 围绕节点的节点，如绕节点 1 的


图 4-6-20　单向放大网格


图 4-6-21　双向放大网格

节点 2,3,4,5. 由这三套数据，就可以记录任意设置的网格相互位置. 采用有限元编号后，就可以根据计算的初始图形以及精度要求，合理地设置网格. 为了提高计算精度，可以在要求精确

的区域用细网格，其它区域用粗网格. 图 4-6-20 是网格尺寸单向逐渐放大的情形，图 4-6-21 是网格尺寸双向逐渐放大的情况. 用有限元编号可以使网格设置更方便，适合于边界复杂的计算域.

4.6.8 HEMP 方法算例

HEMP 方法应用于高速碰撞、爆炸驱动、应力波相互作用等爆炸力学领域数值模拟，只有在大变形情况下遇到困难，下面举几个算例.

(1) B 炸药对铜板接触爆炸，铜板屈服强度 Y_0 取 10Kb，见图 4-6-22.

(2) 高能炸药爆炸驱动铜管，铜的 $Y=10$Kb，见图 4-6-23.

(3) 高能炸药在两点起爆，爆轰波相互作用，并对接触的铜板产生破坏效应，见图 4-6-24.

(4) 爆炸压实金属粉末的数值模拟，见图 4-6-25.

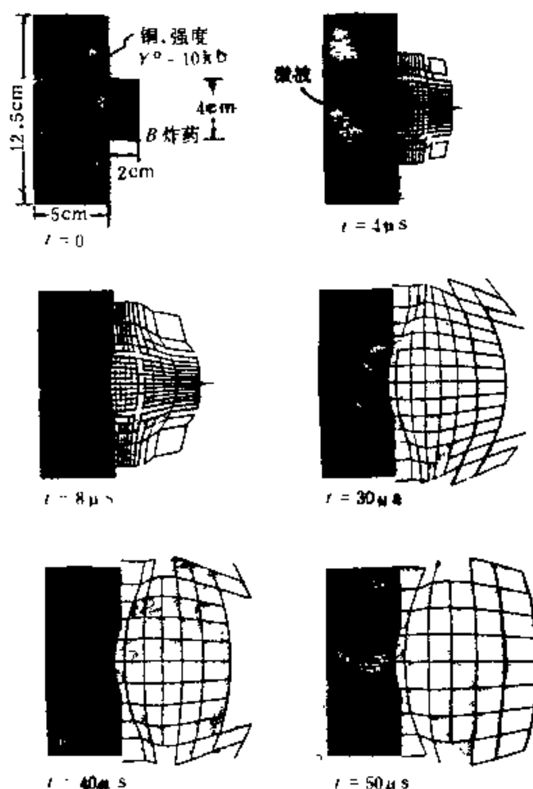


图 4-6-22 炸药对铜接触爆炸

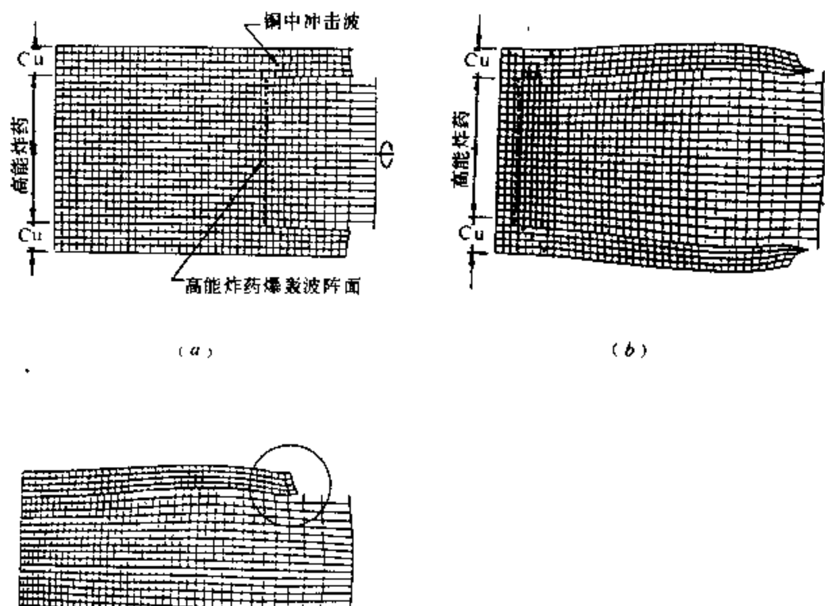


图 1-6-23 高能炸药爆炸驱动铜管

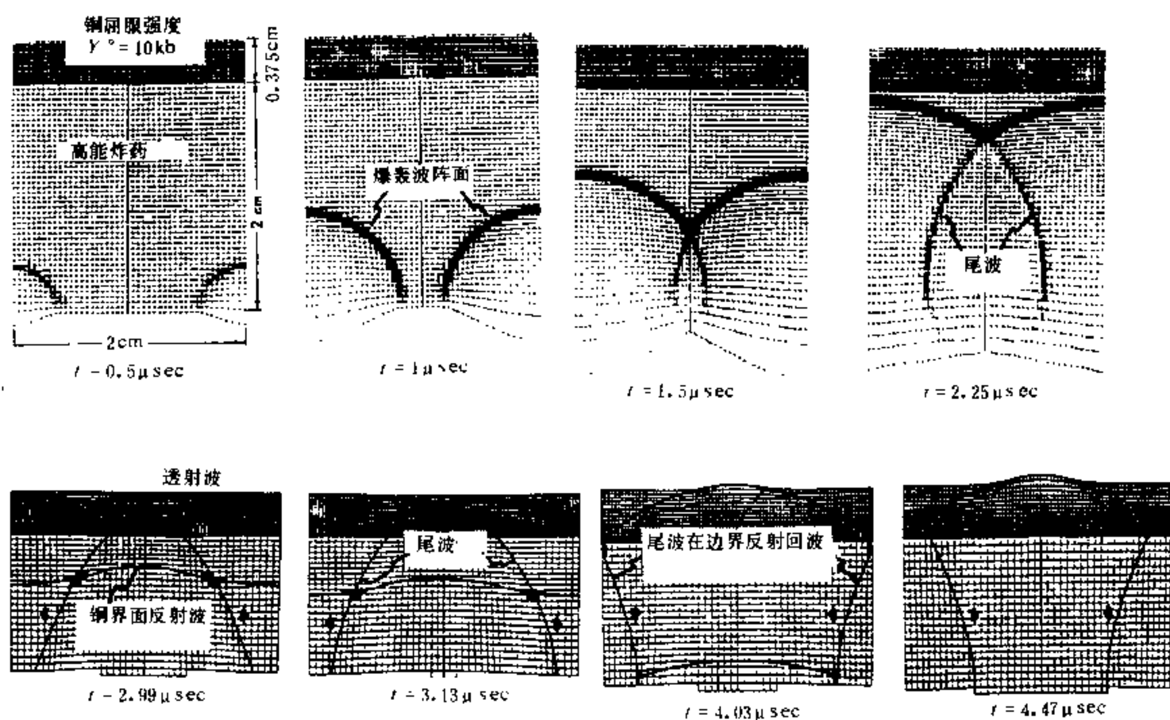


图 4-6-21 高能炸药两点起爆

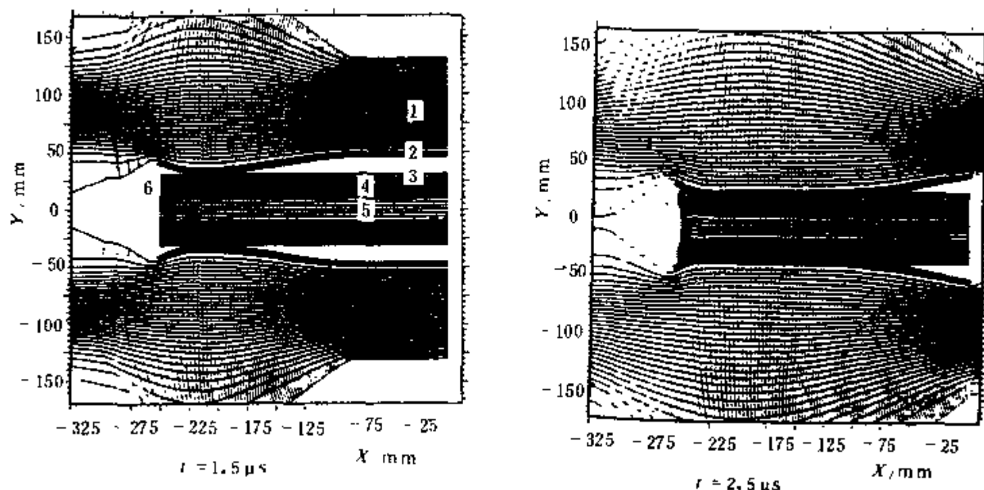


图 4-6-25 爆炸压实金属粉末

1. 炸药；2. 钢飞管；3. 钢管；4. 金属粉末；5. 铝中心棒；6. 钢端塞

§4.7 2DL 方法

2DL 程序是反应介质的二维拉格朗日型程序[16]，2DL 程序可以计算多种介质系统的平面和轴对称问题，介质可以是无反应的，也可以是反应的凝聚相和气相. 化学反应问题用 Arrhnius 反应定律，C—J 定容燃烧，Sharp-Shock 燃烧及 Forest-Fire 燃烧模型. 对固体材料还考虑了弹塑性流动及层裂问题，对于爆轰产物、未反应炸药、二者混合物、具有瞬态相变的未反应凝聚介质等的热力学性质用 HOM 状态方程来描述. 另外还有一些可供选择的子程序，如热传导、真实粘性、重力、弹塑性变形及断裂等. 2DL 中采用的单位是微秒(时间)、厘米(长度)、克(质量)以及兆帕(压力).

4.7.1 流动方程

在三维笛卡尔坐标中，动量守恒和能量守恒关系是

$$\rho\dot{U}_i = \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \rho g_i \tag{4-7-1}$$

$$\rho\dot{I} = -P\rho\dot{V} + S_{ij}d_{ij} + \lambda\nabla^2 T \tag{4-7-2}$$

式中

$$d_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) \tag{4-7-3}$$

对于二维平面对称($\alpha=1$)和轴对称($\alpha=2$)的几何形状(对圆柱形 x 表示径向坐标)，(4-7-1)式和(4-7-2)式变为

$$a_x = \dot{U}_x = V\left[\frac{\partial(S_{xx} - P)}{\partial x} + \frac{\partial S_{xz}}{\partial z} + \frac{(\alpha - 1)}{x}(2S_{xx} + S_{zz})\right] + g_x \tag{4-7-4}$$

$$a_z = \dot{U}_z = V\left[\frac{\partial(S_{zz} - P)}{\partial z} + \frac{\partial S_{xz}}{\partial x} + \frac{(\alpha - 1)}{x}(S_{xz})\right] + g_z \tag{4-7-5}$$

$$\dot{I}=-P\dot{V}+V\left\{S_{xx}\left[\frac{\partial U_x}{\partial x}-(\alpha-1)\frac{U_x}{x}\right]+S_{zz}\left[\frac{\partial U_z}{\partial z}-(\alpha-1)\frac{U_x}{x}\right]+S_{xz}\left[\frac{\partial U_x}{\partial z}+\frac{\partial U_z}{\partial x}\right]\right.$$
$$\left.+\lambda\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}+\frac{\alpha-1}{x}\frac{\partial T}{\partial x}\right]\right\} \quad (4\text{-}7\text{-}6)$$

式中U_x、U_z为速度分量，S_{xx}，S_{zz}，S_{xz}为应力偏量，λ为拉梅系数，a_x和a_z为加速度分量，I为比内能.

4.7.2 粘性

在有限差分的数值计算程序中，粘性起到限制冲击波前沿梯度的作用，它用体积粘性项q和偏粘性分量q_{xx}，q_{zz}和q_{xz}来表示，将其分别加到上述式中的P，S_{xx}，S_{zz}，S_{xz}中去.

(1) 人工粘性

$$q_{xx}=q_{zz}=q_{xz}=0 \quad (4\text{-}7\text{-}7)$$

$$q=\begin{cases}\dfrac{K\Delta t}{V}|\dot{V}| & \dot{V}<0\\ 0 & \dot{V}>0\end{cases} \quad (4\text{-}7\text{-}8)$$

式中Δt是时间步长，K是与应力同单位的常量.

(2) 真实粘性

$$q_{xx}=2\mu_V\left(\frac{\partial U_x}{\partial x}-\frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) \quad (4\text{-}7\text{-}9)$$

$$q_{xz}=\mu_V\left(\frac{\partial U_x}{\partial x}+\frac{\partial U_z}{\partial x}\right) \quad (4\text{-}7\text{-}10)$$

$$q_{zz}=2\mu_V\left(\frac{\partial U_z}{\partial z}-\frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) \quad (4\text{-}7\text{-}11)$$

$$q=-\left(\lambda_V+\frac{2}{3}\mu_V\right)\frac{\dot{V}}{V} \quad (4\text{-}7\text{-}12)$$

式中μ_V和λ_V是真实粘性系数.

4.7.3 状态方程(HOM)

压力和温度用比容、比内能以及凝聚相—气相混合物中凝聚相的质量分数W来表示，$W=\dfrac{M_s}{M_g+M_s}$，式中M_s为凝聚相质量，M_g为气相质量.

(1) 凝聚介质(固相或液相)

在这种情况下，凝聚相的质量分数W为1，比内能为I_s，比容为V_s，温度为T_s，Mie-Grüneisen方程给出的固体压力P_s与V_s和I_s的关系(下标s表示凝聚相)为

$$P_s=P_r(V_s)+\frac{\gamma_s}{V_s}[I-I_r(V_s)] \quad (4\text{-}7\text{-}13)$$

式中$P_r(V_s)$，$I_r(V_s)$是压力和内能作为V_s函数的"参考"曲线，V_0为初始比容，当$V_s\leqslant V_0$时，Hugoniot线是参考曲线，Grüneisen系数γ_s由下式定义：

$$\gamma_s=V_s(\partial P_s/\partial I_s)_{V_s} \quad (4\text{-}7\text{-}14)$$

对于实际材料，实验的Hugoniot数据表示为冲击波速度(U_s)和质点速度(U_p)的线性关系

$$U_s=C+SU_p \quad (4\text{-}7\text{-}15)$$

$$P_H = [C^2(V_0 - V_s)]/[V_0 - S(V_0 - V_s)]^2 \tag{4-7-16}$$

$$I_H = \frac{1}{2} p_H(V_0 - V_s) \tag{4-7-17}$$

式中下标 H 表示冲击绝热状态．C，S 为常数．对于压缩区域($V_s \leqslant V_0$)，P_s，V_s，I_s 的关系为：

$$P_s = P_H + \frac{\gamma_s}{V_s}[I_s - I_H(V_s)] \tag{4-7-18}$$

Hugoniot 温度 T_H 采用 Walsh-Christian 技术，将 $\ln T_H$ 拟合成 $\ln V_s$ 的四次多项式，即

$$\ln T_H = F_s + G_s \ln V_s + H_s(\ln V_s)^2 + I_s(\ln V_s)^3 + J_s(\ln V_s)^4 \tag{4-7-19}$$

式中 F_s、G_s、H_s、I_s、J_s 是系数．为了从 Hugoniot 式中得到温度，就要应用热力学关系式：$(\partial T_s/\partial I_s)_{V_s} = 1/C_V$，因此，只要 C_V 保持不变，就有

$$T_s = T_H(V_s) + (I_s - I_H)/C_V \tag{4-7-20}$$

对于 $V_s = V_0$ 的情况，可以指定 C 和 S 的两组系数来模拟发生相变的材料(见图 4-7-1)；当 $V_{sw} < V_s \leqslant V_0$，应用(4-7-15)式中的 C、S 值；当 $V_s < V_{min}$，方程(4-7-16)式中的 C 和 S 分别用 C_1 和 S_1 来代替；当 $V_{min} < V_s < V_{sw}$，压力为常量：

$$P_{sw} = [C^2(V_0 - V_{min})]/[V_0 - S(V_0 - V_{min})]^2$$

当 $V_{sw} < V_s < V_0$，用曲线 Ⅰ；当 $V_{min} < V_s < V_{sw}$，$P_H = P_{sw}$(常量)；当 $V_s < V_{min}$，用曲线 Ⅱ；当 $\hat{V}_s < V_s < V_{min}$，图 4-7-1 所示的组合 Hugoniot 线出现双波结构，并且能量方程(4-7-11)式修改为

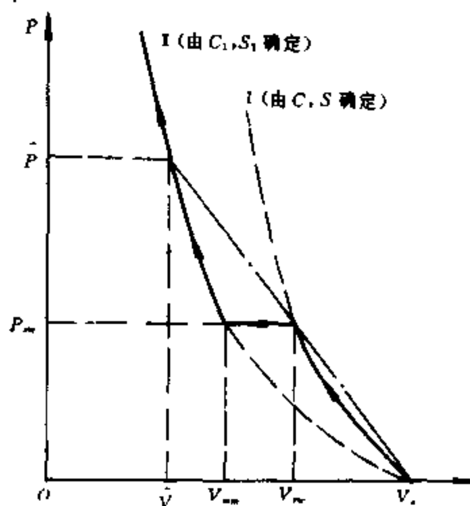


图 4-7-1　发生相变的材料 Hugoniot 曲线

$$I_H = I_{sw} + \frac{1}{2}(P_H + P_{sw})\cdot(V_{sw} - V_s) \tag{4-7-21}$$

式中
$$I_{sw} = \frac{1}{2}(P_0 + P_{sw})(V_0 - V_{sw}) \tag{4-7-22}$$

当 $V_s < \hat{V}$，两波合为一个，又可以采用方程(4-7-17)式。当比容大于 V_0 时，也可以应用 Mie-Grüneisen 方程(4-7-13)式，但 $P_s = 0$ 作为参考曲线，根据热力学关系式

$$(\partial I_s/\partial V_s)_{P_s} = C_p/(3\alpha V_s) - P_s \tag{4-7-23}$$

假定$(C_p/3\alpha V_s) \doteq C_V/(3\alpha V_0)$是一个常量，这里 α 是热膨胀线性系数，C_p，C_v 就是通常的比热．因此，沿 $P_s = 0$，有

$$I_s(V_s) \doteq [C_V/(3\alpha V_0)](V_s - V_0) \tag{4-7-24}$$

因此在 $V_s > V_0$ 的区域内，P_s，V_s，I_s 之间的关系为

$$P_s \doteq \frac{\gamma_s}{V_s}\left[I_s - \frac{C_V}{3\alpha}\left(\frac{V_s}{V_0} - 1\right)\right] \tag{4-7-25}$$

当 $V_s > V_0$ 时的温度计算根据热力学关系式：

$$(\partial I_s/\partial T_s)_{P_s} = C_p - 3\alpha P_s V_s \tag{4-7-26}$$

如果做下述近似：$C_p \approx C_v$（不必与上述近似一致），则沿 $P_s = 0$ 参考线有

$$T_r(V_s) \cong T_0 + T_r(V_s)/C_v \tag{4-7-27}$$

沿这条参考线的温度可由关系式 $(\partial T_s/\partial I_s)_{V_s} = 1/C_v$ 得

$$T_s = T_r(V_s) + [I_s - I_r(V_s)]/C_v \tag{4-7-28}$$

或 $T_s \cong T_0 + I_s/C_v \quad (V_s > V_0)$ (4-7-29)

凝聚介质的弹塑性流动，可用虎克定律和 Von-Mises 屈服条件来计算，在弹性区域（材料单元的旋转角速度为 $\dot{\omega}$）有

$$\dot{S}_{xx} = 2\mu\left(\frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) + 2\dot{\omega} S_{xz} \tag{4-7-30}$$

$$\dot{S}_{xz} = \mu\left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x}\right) - \dot{\omega}(S_{xx} - S_{zz}) \tag{4-7-31}$$

$$\dot{S}_{zz} = 2\mu\left(\frac{\partial U_z}{\partial z} - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) - 2\dot{\omega} S_{xz} \tag{4-7-32}$$

式中 $$\dot{\omega} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_x}{\partial z} - \frac{\partial U_z}{\partial x}\right) \tag{4-7-33}$$

Von-Mises 屈服准则：令

$$f = S_{ij}S_{ij} = 2(S_{xx}^2 + S_{xz}^2 + S_{zz}^2 + S_{xx}S_{zz}) \tag{4-7-34}$$

当 $f \leqslant \frac{2}{3}Y_0^2$ 时，按(4-7-30)至(4-7-33)式计算应力偏量，当 $f > \frac{2}{3}Y_0^2$ 时，每一个偏应力分量都应乘以 $(2Y_0^2/3f)^{1/2}$，即

$$S_{ij} = (2Y_0^2/3f)^{1/2} S_{ij}$$

(2)气相介质爆轰产物)

这种情况下质量分数 $W=0$，比容为 V_g，比内能为 I_g，温度为 T_g，Mie-Grüneisen 方向给出了气体压力 P_g 与 V_g、I_g 的关系（下标 g 表示气相）

$$P_g = P_i(V_g) - \frac{1}{V_g}\left(\frac{\partial \ln T_g}{\partial \ln V_g}\right)_i [I_g - I_i(V_g)] \tag{4-7-35}$$

上式中的 i 表参考曲线，它通过爆轰产物的 C-J 状态是等熵的（$S=$ 常数），热力学量用 FORTRAN BKW 来计算，用最小二乘法拟合得到下列关系：

$$y = \ln P_i = A + Bx + Cx^2 + Dx^3 + Ex^4 \tag{4-7-36}$$

$$\ln(I_i + Z) = K + Ly + My^2 + Ny^3 + Oy^4 \tag{4-7-37}$$

$$\ln T_i = Q + Rx + Sx^2 + Tx^3 + Ux^4 \tag{4-7-38}$$

式中 $x=\ln V_g$，A，…，U 是状态方程常量，Z 是一个常量，以便在拟合中使之满足 $I_i + Z > 0$。所以方程(4-7-35)式可以写成

$$P_g = P_i(V_g) + \frac{1}{\beta V_g}[I_g - I_i(V_g)] \tag{4-7-39}$$

而 $$-(1/\beta) = R + 2S\ln V_g + 3T(\ln V_g)^2 + 4U(\ln V_g)^3 \tag{4-7-40}$$

温度可由下述得到

$$T_g = T_i(V_g) + \frac{1}{C_V}[I_g - I_i(V_g)] \tag{4-7-41}$$

式中 C'_V 是气相介质的比热容.

(3) 凝聚相和气相混合介质

当质量分数即不为 0，又不为 1 时，系统中便同时存在两相介质，假定两组分的压力和温度相同：

$$P = P_g = P_s \tag{4-7-42}$$

$$T = T_g = T_s \tag{4-7-43}$$

总比容和内能为

$$V = WV_s + (1 - W)V_g \tag{4-7-44}$$

$$I = WI_s + (1 - W)I_g \tag{4-7-45}$$

(4-7-20)式乘以 WC_v，(4-7-41)式乘以 $(1-W)C_v$，然后相加，代入(4-7-43)式和(4-7-45)式就得到

$$T = \frac{I - WI_H - (1 - W)I_i + WT_H C_v + (1 - W)T_i C'_v}{WC_v + (1 - W)C'_v} \tag{4-7-46}$$

由(4-7-18)式和(4-7-20)式有

$$P_s = P_H + \frac{\gamma_s C_v}{V_s}(T_s - T_H) \tag{4-7-47}$$

由(4-7-39)式和(4-7-20)式得

$$P_g = P_i + \frac{C'_v}{\beta V_g}(T_g - T_i) \tag{4-7-48}$$

联立方程(4-7-47)，(4-7-48)，(4-7-42)，(4-7-43)，(4-7-46)式，于是得到

$$P_H - P_i + \left(\frac{\gamma_s C_v}{V_s} - \frac{C'_v}{\beta V_g}\right)T - \frac{\gamma_s C_V T_H}{V_s} + \frac{C'_v T_i}{\beta V_g} = 0 \tag{4-7-49}$$

如果 I，V，W 已知，则可用交叉法对 V_s 或 V_g 进行迭代，直到满足方程(4-7-49)式为止. 开始迭代时，需要取两个初值，当 $V<V_0$，对 V_s 进行迭代，两初始值取 $V_s=V_0$ 和 $V_s=0.999V_0$；当 $V\geqslant V_0$，对 V_g 进行迭代，两初值取 $V_g=(V-0.9V_0W)/(1-W)$ 和 $V_g=1.002(V-0.9V_0W)/(1-W)$. 如果迭代失去物理意义($V_g$ 或 $V_s\leqslant 0$)，这时就取 $V_s=V_g=V_0$ 知道 V_s 和 V_g 后，就可以求 P 和 T.

4.7.4 燃烧模型

某时刻反应系统中有未反应物质量 M_s，已反应物质量 M_g，定义反应度 λ 为

$$\lambda = \frac{M_g}{M_g + M_s}$$

下面介绍几种常用的反应速率方程.

(1) Arrhenius 模型

$$\dot{\lambda} = -Z(1 - \lambda)\exp(-E^*/RT) \tag{4-7-50}$$

式中 $\dot{\lambda}$ 为反应速率，Z 为频率因子，E^* 为活化能，R 是气体常数，差分格式为

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n - \Delta t(1 - \lambda^n)Z\exp(-E^*/RT^{n+1}) \tag{4-7-51}$$

(2) Forest Fire 模型

$$\dot{\lambda} = -(1 - \lambda)\exp\left(\sum_{i=0}^{N} a_i P^i\right) \tag{4-7-52}$$

式中 a_i 为系数，由楔形试验得到的 POP 图拟合得到. POP 图是指楔形试验得到的炸药初始冲击压力 P^* 和爆轰成长距离 x^* 的关系曲线. Forest Fire 模型的原理是假设不论初始条件如何，炸药承受同样 P^* 时，就在相同的传播距离达到相同的分解状态. 差分格式为

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n - \Delta t(1-\lambda^n)\exp\left[\sum_{i=0}^{N} a_i (P^{n-1})^i\right] \tag{4-7-53}$$

(3) Cochran 模型[17]

$$\lambda = \omega_1 P^n(\lambda_0 - \lambda) + \omega_2 P^m \lambda(1-\lambda) \tag{4-7-54}$$

式中 ω_1、ω_2、n 和 m 为常数，公式右端第一项为热点成核贡献，第二项为热点成长贡献，λ_0 是成核过程中的炸药反应度.

(4) 点火与增长模型[18]

此模型认为冲击波使少量炸药点火，其压力受压力及表面积控制，热点燃烧发展，使热点间的炸药在 $10^{-6}s$ 内耗尽. 方程形式为

$$\begin{aligned} \dot{\lambda} &= I(1-\lambda)^x \eta^\gamma + G(1-\lambda)^x \lambda^y P^z \\ \eta &= v_0/v_1 - 1 \end{aligned} \tag{4-7-55}$$

式中，v_1 为受冲击而未反应炸药的比容；I、x、y、z、γ、G 为常数。方程右端第一项表示热点形成的贡献，用 η^γ 来描述不同的热点形成机制，第二项为热点成长的贡献，用 G 表示表面积与体积之比，用 P^z 表示与压力相关的燃烧速率. 根据空穴倒塌的热点形成模型，取热点为球形，可以推导得(4-7-55)式中 $x=2/9$，$\gamma=4$，$y=2/3$. 关于反应速率方程的讨论，详见章冠人和陈大年著作[19].

4.7.5 差分方程

网格为四边形，x、z 方向的速度分量为(u_x, u_z)，其欧拉位置为(x,z)，由形成拉氏网格的交线来确定. 假设一排有 N 个网格，必须具有 $N+1$ 组速度分量和坐标，其它量(P,T,W,M,I,V)是网格中心量，因此每一排网格只需要 N 个组.

(1) 网格体积

如图 4-7-2 所示，将四边形网格分成两个三角形，三角形面积为

$$A_U = \frac{1}{2}[(z_A - z_H)(x_D - x_H) - (x_A - x_H)(z_D - z_H)] \tag{4-7-56}$$

$$A_L = \frac{1}{2}[(z_D - z_O)(x_A - x_O) - (x_D - x_O)(z_A - z_O)] \tag{4-7-57}$$

$$A = A_U + A_L \tag{4-7-58}$$

重心半径为

$$\overline{X}_U = \frac{1}{3}(x_H + x_D + x_A) \tag{4-7-59}$$

$$\overline{X}_L = \frac{1}{3}(x_D + x_O + x_A) \tag{4-7-60}$$

网格的比容为

$$V^{n+1} = \frac{A_L(\overline{X}_L)^{\sigma-1} + A_U(\overline{X}_U)^{\sigma-1}}{M} \tag{4-7-61}$$

常量$(2\pi)^{\sigma-1}$没有包括在内.

(2) 粘弹塑性流动

人工粘性

$$q^{n+1}=\begin{cases}\dfrac{k}{V^n}|V^{n+1}-V^n| & \\ 0 & (V^{n+1}\geq V^n)\end{cases}\tag{4-7-62}$$

$$q_{rr}=q_{rz}=q_{zz}=0\tag{4-7-63}$$

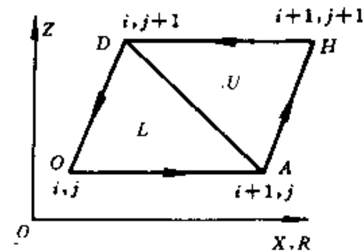


图 4-7-2 四边形拉氏网格体积计算被分为上三角形(U)和下三角形(L)四边形总面积为 $A=A_U+A_L$

在平面情况下,$U_r U_z$ 的偏微分应用格林公式,如果 $F(r,z)$ 是任意连续函数,则

$$\frac{\partial F}{\partial r}=\lim_{A\to 0}\frac{1}{A}\oint F(r,z)\mathrm{d}z\tag{4-7-64}$$

$$\frac{\partial F}{\partial z}=-\lim_{A\to 0}\frac{1}{A}\oint F(r,z)\mathrm{d}r\tag{4-7-65}$$

式中面积 A 和积分路线如图 4-7-2 所示. 根据上述关系,速度梯度可表示为

$$\left(\frac{\partial u_r}{\partial r}\right)^{n+1}=\frac{1}{2A}[(U_r^A-U_r^D)(z_H-z_O)+(U_r^H-U_r^O)(z_D-z_A)]\tag{4-7-66}$$

$$\left(\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)^{n+1}=\frac{1}{2A}[(U_z^A-U_z^D)(r_H-r_O)+(U_z^H-U_z^O)(z_D-z_A)]\tag{4-7-67}$$

$$\left(\frac{\partial U_r}{\partial z}\right)^{n+1}=-\frac{1}{2A}[(U_r^A-U_r^D)(r_H-r_O)+(U_r^H-U_r^O)(r_D-r_A)]\tag{4-7-68}$$

$$\left(\frac{\partial U_z}{\partial r}\right)^{n+1}=\frac{1}{2A}[(U_z^A-U_z^D)(z_H-z_O)+(U_z^H-U_z^O)(z_D-z_A)]\tag{4-7-69}$$

和

$$\left(\frac{\dot V}{V}\right)^{n+1}=\frac{2}{\Delta t}\left(\frac{V^{n+1}-V^n}{V^{n+1}+V^n}\right)\tag{4-7-70}$$

真实粘性

$$q^{n+1}=\left(\lambda+\frac{2}{3}\mu\right)\left(\frac{\dot V}{V}\right)^{n+1}\tag{4-7-71}$$

$$q_{rr}^{n+1}=2\mu\left[\left(\frac{\partial U_r}{\partial r}\right)^{n+1}-\frac{1}{3}\left(\frac{\dot V}{V}\right)^{n+1}\right]\tag{4-7-72}$$

$$q_{rz}^{n+1}=\mu\left[\left(\frac{\partial U_r}{\partial z}\right)^{n+1}-\left(\frac{\partial U_z}{\partial r}\right)^{n+1}\right]\tag{4-7-73}$$

$$q_{zz}^{n+1}=2\mu\left[\left(\frac{\partial U_z}{\partial z}\right)^{n+1}-\frac{1}{3}\left(\frac{\dot V}{V}\right)^{n+1}\right]\tag{4-7-74}$$

(3) 弹塑性流动

$$S_{rr}^{n+1}=S_{rr}^n+2\Delta t\left\{\mu\left[\left(\frac{\partial U_r}{\partial r}\right)^{n+1}-\frac{1}{3}\left(\frac{\dot V}{V}\right)^{n+1}\right]+\dot\omega S_{rz}^n\right\}\tag{4-7-75}$$

$$S_{rz}^{n+1}=S_{rz}^n+\Delta t\left\{\mu\left[\left(\frac{\partial U_r}{\partial z}\right)^{n+1}+\left(\frac{\partial U_z}{\partial r}\right)^{n+1}\right]-\dot\omega(S_{rr}^n-S_{zz}^n)\right\}\tag{4-7-76}$$

$$S_{zz}^{n+1}=S_{zz}^n+2\Delta t\left\{\mu\left[\left(\frac{\partial U_z}{\partial z}\right)^{n+1}-\frac{1}{3}\left(\frac{\dot V}{V}\right)^{n+1}\right]-\dot\omega S_{rz}^n\right\}\tag{4-7-77}$$

$$\omega = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial U_r}{\partial z}\right)^{n+1} - \left(\frac{\partial U_z}{\partial r}\right)^{n+1}\right] \tag{4-7-78}$$

为了确定是否发生塑性流动，计算

$$f = R[(S_{rr}^{n+1})^2 + (S_{zz}^{n+1})^2 + (S_{\theta\theta}^{n+1})^2 + S_{rr}^{n+1}S_{zz}^{n+1}] \tag{4-7-79}$$

若 $f \leqslant \frac{2}{3}Y_0^2$，材料是弹性状态，$S_{rr}$、$S_{rz}$、$S_{zz}$ 保持不变，若 $f > \frac{2}{3}Y_0^2$，便是塑性流动，所以每一个偏应力分量都应乘一个因子.

$$F = \sqrt{\frac{2Y_0^2}{3f}} \tag{4-7-80}$$

然后，把真实粘性应力 q_{rr}、q_{rz}、q_{zz}（若存在的话）加到它们相应的偏应力分量上，在由(4-7-75)—(4-7-77)式进行下一个时间周期的应力偏量计算之前，必须从 S_{rr}、S_{rz}、S_{zz} 中减去粘性分量.

(4) 能量

在 $n+1$ 时刻 U_r 等的偏微分由(4-7-66)-(4-7-69)式出，因此

$$\begin{aligned} I^{n+1} - I^n &= -(v^{n+1} - v^n)(p^n + q^n) + \frac{v^{n+1} + v^n}{2}\Delta t\left\{\left[\left(\frac{\partial U_r}{\partial r}\right)^{n+1} - (\alpha - 1)\left(\frac{U_r^A + U_r^0}{x_A + x_0}\right)\right]S_{rr}^{n+1}\right. \\ &\quad + S_{zz}^{n+1}\left[\left(\frac{\partial U_z}{\partial z}\right)^{n+1} - (\alpha - 1)\left(\frac{U_r^A + U_r^0}{x_A + x_0}\right)\right] + S_{rz}^{n+1}\left[\left(\frac{\partial U_r}{\partial z}\right)^{n+1} + \left(\frac{\partial U_z}{\partial r}\right)^{n+1}\right]\Bigg\} \\ &\quad + \lambda\Delta t + \frac{V^{n+1} + V^n}{2}\left[\frac{T_1 - 2T_1 + T_6}{(x_A - x_0)^2} + \frac{T_5 - 2T_1 + T_2}{(z_D - z_0)^2} + \frac{\alpha - 1}{x_0}\left(\frac{T_4 - T_6}{x_C - x_A}\right)\right] \end{aligned} \tag{4-7-81}$$

I、V、P、Q、T、S_{rr} 等都是网格中的量，如图 4-7-3 所示，除非是另有说明，否则方程(4-7-81)所计算的就是网格 1.

(5) 压力和温度

知道 I^{n+1}、V^{n+1} 和 W^{n+1} 以后，就可用第 4-7-3 节所述的 Hom 状态方程求解 P_{Hom}^{n+1} 和 T^{n+1}.

在子程序 Hom 中的压力 P_{Hom}^{n+1} 时计算是以 U、U_p 数据为依据的，而这些数据并未由于材料强度的影响而加以修正，也就是说，未经修正的压力测量（更确切地说是单向应力）常常包含有由于材料剪切强度的影响，这个影响的量可能大至 $\frac{2}{3}Y_0$. 在较低的压力下，Hom 计算是准确的，在较大压力下，采用一种简单的方法对 Hom 计算压力进行修正. 定义一个量 P_{cp}，当 $P_{\text{Hom}}^{n+1} \geqslant P_{cp}$ 时，从 P_{Hom}^{n+1} 中减去 $\frac{2}{3}Y_0$ 时，当 $P_{\text{Hom}}^{n+1} \leqslant P_{cp}$ 时，修正成比例下降，即

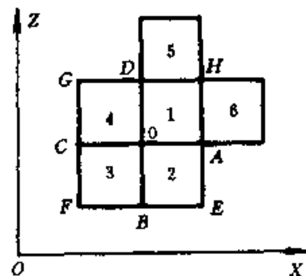


图 4-7-3 网格编号

$$P^{n+1} = P_{\text{Hom}}^{n+1} - \left(\frac{2}{3}Y_0\right)F \tag{4-7-82}$$

式中

$$F = \begin{cases} P_{\text{Hom}}^{n+1}/P_{cp} & (P_{\text{Hom}}^{n+1} \leqslant P_{cp}) \\ 1 & (P_{\text{Hom}}^{n+1} > P_{cp}) \end{cases}$$

(6) 炸药燃烧

燃烧速率的数值计算已经在 4.7.4 节进行了介绍，在此不再重复.

(7) 加速度分量 a_x 和 a_z

定义下述量

$$P_{ix} = (P^{n+1})_i + (q^{n+1})_i - (S^{n+1}_{xx})_i \tag{4-7-83}$$

$$P_{iz} = (P^{n+1})_i + (q^{n+1})_i - (S^{n+1}_{zz})_i \tag{4-7-84}$$

$$S^i_{xz} = (S^{n+1}_{xz})_i \tag{4-7-85}$$

式中 $i=1,2,3,4$，是图 4-7-3 所示的网格，S_{xx}、S_{zz}、S_{xz} 中分别包含有 q_{xx}、q_{zz}、q_{xz}，图 4-7-3 中点 0 的 x 向和 z 向加速度如下：

$$\begin{aligned}
a_x =& -\frac{(P_{1x}-P_{4x})(z_D-z_0)}{M_1+M_4}\left(\left|\frac{x_D+x_0}{2}\right|\right)^{\alpha-1} - \frac{(P_{2x}-P_{3x})(z_0-z_B)}{M_2+M_3}\left(\left|\frac{x_0+x_B}{2}\right|\right)^{\alpha-1} \\
&+ \frac{(P_{1x}-P_{2x})(z_A-z_0)}{M_1+M_2}\left(\left|\frac{x_A+x_0}{2}\right|\right)^{\alpha-1} + \frac{(P_{4x}-P_{3x})(z_0-z_C)}{M_4+M_3}\left(\left|\frac{x_0+x_C}{2}\right|\right)^{\alpha-1} \\
&- \frac{(S^1_{xz}-S^4_{xz})(x_D-x_0)}{M_1+M_4}\left(\left|\frac{x_D+x_0}{2}\right|\right)^{\alpha-1} - \frac{(S^2_{xz}-S^3_{xz})(x_0-x_B)}{M_2+M_3}\left(\left|\frac{x_0+x_B}{2}\right|\right)^{\alpha-1} \\
&+ \frac{(S^1_{xz}-S^2_{xz})(x_A-x_0)}{M_1+M_2}\left(\left|\frac{x_A+x_0}{2}\right|\right)^{\alpha-1} + \frac{(S^4_{xz}-S^3_{xz})(x_0-|x_c|)}{M_4+M_3}\left(\left|\frac{x_0+x_c}{2}\right|\right)^{\alpha-1} \\
&+ \frac{(\alpha-1)V^{n+1}}{\frac{x_0+x_A}{2}}(2S^1_{xx}-S^1_{zz}) + g_x
\end{aligned} \tag{4-7-86}$$

$$\begin{aligned}
a_z =& \frac{(P_{1z}-P_{4z})(x_D-x_0)}{M_1+M_4}\left(\left|\frac{x_D+x_0}{2}\right|\right)^{\alpha-1} + \frac{(P_{2z}-P_{3z})(x_0-x_B)}{M_2+M_3}\left(\left|\frac{x_0+x_B}{2}\right|\right)^{\alpha-1} \\
&- \frac{(P_{1z}-P_{2z})(x_A-x_0)}{M_1+M_2}\left(\left|\frac{x_A+x_0}{2}\right|\right)^{\alpha-1} - \frac{(P_{4z}-P_{3z})(x_0-|x_c|)}{M_4+M_3}\left(\left|\frac{x_0+x_c}{2}\right|\right)^{\alpha-1} \\
&+ \frac{(S^1_{xz}-S^4_{xz})(z_D-z_0)}{M_1+M_4}\left(\left|\frac{x_D+x_0}{2}\right|\right)^{\alpha-1} + \frac{(S^2_{xz}-S^3_{xz})(z_0-z_B)}{M_2+M_3}\left(\left|\frac{x_0+x_B}{2}\right|\right)^{\alpha-1} \\
&- \frac{(S^1_{xz}-S^2_{xz})(z_A-z_0)}{M_1+M_2}\left(\left|\frac{x_A+x_0}{2}\right|\right)^{\alpha-1} - \frac{(S^4_{xz}-S^3_{xz})(z_0-z_c)}{M_4+M_3}\left(\left|\frac{x_0+x_c}{2}\right|\right)^{\alpha-1} \\
&+ \frac{(\alpha-1)V^{n+1}}{\frac{x_0+x_A}{2}}(S^1_{xz}) + g_z
\end{aligned} \tag{4-7-87}$$

(8) 边界

边界可能是自由边界、活塞、连续边界、轴、或滑移面．角上需要做特殊处理，其方法取决于角上特定的边界组合。

自由边界：边界两边的网格中的压力和应力偏量符号相反；

活塞边界：边界网中压力取成活塞压力；

连续边界：两边的压力和应力偏量均相等；

轴：　　两边的压力和应力偏量均相等．

靠近边界网格的网格坐标可由线性外推来计算．

对于滑移面有专门处理方法，在此不作介绍．

(9) 网格质点速度

$$U_x^{n+1} = U_x^n + a_x\Delta t$$

$$U_z^{n+1} = U_z^n + a_z\Delta t$$

第三步

(10) 网格边界位置

$$x^{n+1} = x^n + U_x^{n+1}\Delta t$$

$$z^{n+1} = z^n + U_z^n \Delta t$$

如果由新网格边界算出来的体积为负数，则就取老网格边界，即速度 U_x,U_z 都取成零，这就是所谓的“人工粗略重分法”(Poor Man's regone).

§ 4.8 ALE 方法

为了扩展程序的功能，欧拉型程序中吸收了拉氏算法，如各种示踪点计算，拉氏型程序中吸收了欧拉算法，如重分网格计算. 拉氏—欧拉混合型程序与上述不同，更彻底的发挥了两种坐标系的优点. 混合型程序有各种混合方法，CEL 方法是将解域空间分开，根据课题的需要，不同的解域用不同的坐标系，如图 4-8-1[20]. E^0 解域用欧拉法解，L_1^0、L_2^0 和 L_3^0 解域用拉氏法解，称为耦合欧拉—拉氏法(Coupled-Euler-Lagrange). 体平均多流管法采用由自然界面和人为界面组成的一族曲线[22]，该曲线组成许多“流管”，流管具有拉氏性质，互相之间没有物质输运，但流管本身由欧拉线划分网格，互相间有物质输运，亦即一族网格线是拉氏的，另一族网格线欧拉的. 还有一种独特的方法就是任意拉氏—欧拉方法 ALE(Arbitrary Lagrangian Eulerian)[21]，采用网格速度 $\boldsymbol{D}$，当 $\boldsymbol{D}=0$ 时为欧拉法. 当 $\boldsymbol{D}=\boldsymbol{u}$,$\boldsymbol{u}$ 为流场质点速度时，为拉氏法，在 ALE 法中，$\boldsymbol{D}$ 可以根据计算的需要选取，使计算大为方便. 下面介绍 ALE 方法.

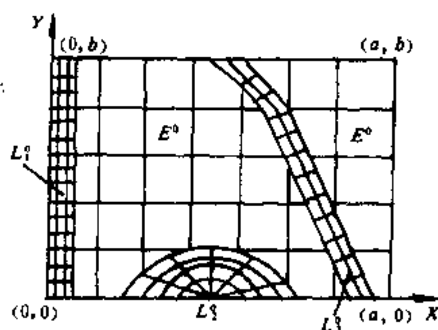


图 4-8-1 CEL 方法的计算域划分

E^0:欧拉法计算域

L_1^0,L_2^0,L_3^0:拉氏法计算域

4.8.1 控制方程组

用二维轴对称流体力学方程组，径向坐标用 r 或 x 表示，轴向坐标用 z 和 y 表示，径向速度分量用 u，轴向速度分量用 v 表示，基本方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho \boldsymbol{f} + \mathrm{div}(\rho \boldsymbol{f} \boldsymbol{u}) = \boldsymbol{g} \tag{4-8-1}$$

式中

$$\boldsymbol{f} = \begin{bmatrix} 1, \\ v, \\ u, \\ e \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\dfrac{\partial P}{\partial r} \\ -\dfrac{\partial P}{\partial z} \\ -\mathrm{div}(\boldsymbol{u}) \end{bmatrix} \begin{matrix} (4\text{-}8\text{-}2) \\ (4\text{-}8\text{-}3) \\ (4\text{-}8\text{-}4) \\ (4\text{-}8\text{-}5) \end{matrix}$$

能量方程的另一形式是以总能 E 代替 e，以 $-\mathrm{div}(P\boldsymbol{u})$ 代替 $-P\mathrm{div}(\boldsymbol{u})$.

4.8.2 网格与参量布置

原则上讲可以是任意形状的网格，但实际应用的都是三角形或四边形网格，当然并不一定是正三角形和矩形. 我们知道，如果取欧拉坐标，则有输运量；若取拉氏坐标则无输运量；而对于任意拉氏—欧拉坐标，不但坐标是运动的而且还有输运量. 设网格速度为 $\boldsymbol{D}$，现对(4-8-1)式在网格上积分，则

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}(t)}\rho f\mathrm{d}V+\int_{\partial\mathscr{D}(t)}\rho f(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{D})\boldsymbol{n}\mathrm{d}s=\iint_{\mathscr{D}(t)}g\mathrm{d}V \tag{4-8-6}$$

式中 $\mathscr{D}(t)$ 表示体元，$\partial\mathscr{D}(t)$ 表示 $\mathscr{D}(t)$ 的表面积. 当取欧拉坐标时

$$\boldsymbol{D}=0 \tag{4-8-7}$$

当取拉氏坐标时

$$\boldsymbol{D}=\boldsymbol{u} \tag{4-8-8}$$

所以取拉氏坐标时，(4-8-6)式中左边第二项为零，网格和变量设置如图4-8-2a 所示，网格用字母来表示，节点用数字来表示，r 方向按 i 编号，z 方向按 j 编号，P、ρ、V、E、e 定义在网格内，r，z，u，v 定义在节点上. 用 R_l 表示节点，$l=1,2,3,4,1,\cdots$ 为循环附标，当 $l=4$ 时，$R_{l+1}=R_1$. 格子体积为

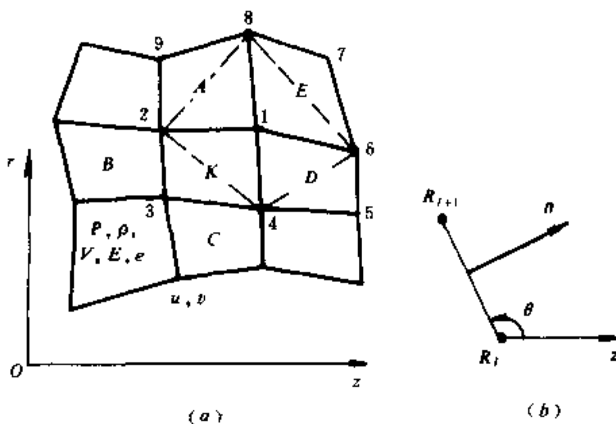


图 4-8-2 ALE 法的网格及变量配置

$$V_k=V_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} \tag{4-8-9}$$

用 l' 表示网格，所以 $l'=A$，B，C，D 等.

4.8.3 差分格式

(1) 对于格子 K，由(4-8-6)式左边第一项的离散

$$\iint_{\mathscr{D}_K(t)}\rho f\mathrm{d}V=\rho_K f_K V_K \tag{4-8-10}$$

所以

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}(t)}\rho f\mathrm{d}V=\frac{1}{\Delta t}[(\rho fV)_K^{n+1}-(\rho fV)_k^n] \tag{4-8-11}$$

(2) (4-8-6)式左边第二项中的$(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{D})\cdot\boldsymbol{n}ds$ 的离散，如图 4-8-2b 所示，取一条边

$$\overrightarrow{R_lR_{l+1}}=(z_{l+1}-z_l,\ r_{l-1},r_l) \tag{4-8-12}$$

其长度记为

$$R_lR_{l+1}=\Delta l \tag{4-8-13}$$

方向为

$$(\cos Q,\ \sin\theta)=\frac{\overrightarrow{R_lR_{l+1}}}{\Delta l} \tag{4-8-14}$$

则 $\boldsymbol{n}$ 的方向为

$$\left[\cos\left(\theta-\frac{\pi}{2}\right),\ \sin\left(\theta-\frac{\pi}{2}\right)\right]=(\sin\theta,\ -\cos\theta)=\left(\frac{r_{l+1}-r_l}{\Delta l},\ \frac{z_l-z_{l+1}}{\Delta l}\right)\quad(4\text{-}8\text{-}15)$$

而

$$D=(D_z,\ D_r)$$
$$\boldsymbol{u}=(v,\ u)\quad(4\text{-}8\text{-}16)$$

则(4-8-6)式左端第二项成为

$$\int_{\mathscr{D}(t)}\rho f(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{D})\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}s=\sum_{l=1}^{4}\int_{R_l}^{R_{l+1}}\rho f(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{D})\boldsymbol{n}2\pi r\mathrm{d}l$$
$$=\sum_{l=1}^{4}(\rho f)_{l,l+1}\left[(v-D_z)_{l,l+1}\frac{r_{l+1}-r_l}{\Delta l}-(u-D_r)_{l,l+1}\frac{z_{l+1}-z_l}{\Delta l}\right]\pi(r_l+r_{l+1})\Delta l$$
$$\triangleq\sum_{l=1}^{4}(\rho f)_{l,l+1}\cdot W_{l,l+1}\cdot S_{l,l+1}$$
$$=\frac{\pi}{2}\sum_{l=1}^{4}(\rho f)_{l,l-1}[(v_l+v_{l+1}-D_{z,l}-D_{z,l+1})(r_{l+1}-r_l)$$
$$-(u_l+u_{l+1}-D_{r,l}-D_{r,l+1})(z_{l+1}-z_l)](r_l+r_{l+1})\quad(4\text{-}8\text{-}17)$$

上式中 $W=(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{D})\boldsymbol{n}$，$S=2\pi r\Delta l$.

(3) (4-8-17)式中 $(\rho f)_{l,l+1}$ 的取法

① DC 法(贡献网格法)

若 $W_{kl,l+1}>0$，则 0 格是贡献网格 DC；若 $W_{kl,l+1}<0$，则 0 是接受网格 AC. 所以由下式定 $(\rho f)_{l,l+1}$

$$(\rho f)_{l,l+1}=\frac{1}{2}(1+\mathrm{sgn}W_{l,l+1})\rho_0 f_0+\frac{1}{2}(1-\mathrm{sgn}W_{l,l+1})\rho_{l'}f_{l'}\quad(4\text{-}8\text{-}18)$$

式中

$$\mathrm{sgn}W_{l,l+1}=\begin{cases}1\\0\\-1\end{cases},\quad 当\ W_{l,l+1}\begin{cases}>0\\=0\\<0\end{cases}\quad(4\text{-}8\text{-}19)$$

②线性插值法.

如图 4-8-3 所示，对于一维情况，ρf 取 $x_k-\frac{1}{2}W_k\Delta t$ 处的值，当 $W_k>0$ 时就是位于"▲"处的值，当 $W_k<0$ 时就是位于"·"处的值，即

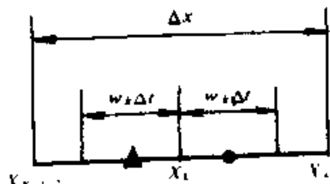


图 4-8-3　线性插值示意图

$$(\rho f)_{x_k-\frac{1}{2}W_k\Delta t}=\frac{x_{k+\frac{1}{2}}-x_k+\frac{1}{2}W_k\Delta t}{\Delta x}(\rho f)_{k-\frac{1}{2}}$$
$$+\frac{x_k-x_{k-\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}W_k\Delta t}{\Delta x}(\rho f)_{k+\frac{1}{2}}$$
$$=\frac{1}{2}\left(1+\frac{W_k\Delta t}{\Delta x}\right)(\rho f)_{k-\frac{1}{2}}+\frac{1}{2}\left(1-\frac{W_k\Delta t}{\Delta x}\right)(\rho f)_{k+\frac{1}{2}}\quad(4\text{-}8\text{-}20)$$

在二维情况下，Δx 定义为相邻两个格子的平均体积与格边旋转面积之比，即

$$\Delta x = \frac{1}{2}\frac{V_k + V_{l'}}{S_{l,l+1}} \tag{4-8-21}$$

所以将其代入(4-8-20)式得

$$(\rho f)_{l,l+1} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{2(WS)_{l,l+1}\Delta t}{V_k + V_{l'}}\right)\rho_0 f_0 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{2(WS)_{l,l+1}\Delta t}{V_k + V_{l'}}\right)\rho_{l'} f_{l'}$$

$$= \frac{1}{2}(\rho_k f_k + \rho_{l'} f_{l'}) - \frac{(WS)_{l,l+1}\Delta t}{V + V_{l'}}(\rho_{l'} f_{l'} - \rho_k f_k) \tag{4-8-22}$$

③ 将(4-8-18)和(4-8-22)式合成一个式子，得

$$(\rho f)_{l,l+1} == \frac{1}{2}(1 + A_{l,l+1})\rho_k f_k + \frac{1}{2}(1 - A_{l,l+1})\rho_{l'} f_{l'} \tag{4-8-23}$$

式中

$$A_{l,l+1} = a\mathrm{sgn}W_{l,l+1} + b\frac{2(WS)_{l,l+1}\Delta t}{V_k + V_{l'}} \tag{4-8-24}$$

若 $a=1$，$b=0$，则为 DC 法；若 $a=0$，$b=1$，则为线性插值法. a，b 可取 0，1 之间的任何值. 用(4-8-23)式代入(4-8-17)式得

$$\int_{\mathscr{S}(t)} \rho f(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{D}) \cdot \boldsymbol{n}\mathrm{d}s = \sum_{l=1}^{4}(\rho f)_{l,l+1}(WS)_{l,l+1}$$

$$= \sum_{l=1}^{4}\left[\frac{1}{2}(1 + A_{l,l+1}\rho_k f_k + \frac{1}{2}(1 - A_{l,l+1})\rho_{l'} f_{l'}\right](WS)_{l,l+1} \tag{4-8-25}$$

(4) 能量方程中右端项的离散

$$\iint_{\mathscr{D}(t)} - \mathrm{div}P\boldsymbol{u}\mathrm{d}V = -\int_{\mathscr{S}(t)} P\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}\mathrm{d}s$$

$$= \frac{\pi}{2}\sum_{l=1}^{4} P_{l,l+1}[(v_l + v_{l+1})(r_{l+1} - r_l) - (u_l + u_{l+1})(z_{l+1} - z_l)](r_l + r_{l+1}) \tag{4-8-26}$$

式中

$$P_{l,l+1} = \frac{1}{2}(P_k + P_{l'}) \tag{4-8-27}$$

$$-\iint_{\mathscr{D}(t)} P\mathrm{div}\boldsymbol{u}\mathrm{d}V = P_k\int_{\mathscr{S}(t)} \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}\mathrm{d}s$$

$$= P_k\frac{\pi}{2}\sum_{l=1}^{4}[(v_l + v_{l+1})(r_{l+1} - r_l)$$

$$- (u_l + u_{l+1})(z_{l+1} - z_l)](r_l + r_{l+1}) \tag{4-8-28}$$

(5) 动量方程的离散

因为 v，u 定义在节点，故其它量也求节点值. 体积取积分体积，但要注意的是，若取 1 点周围四个格心作顶点的四边形，当变形大时，1 点可能位于四边形外，也可能包括了四个格子以外的体积，如图 4-8-4a 所示，因此取四个格子对角线组成的四边形为积分体积，如图 4-8-4b 所示.

因此(4-8-4)中第一项

$$\iint_{\mathscr{D}_1(t)} \rho u\mathrm{d}V = \rho_1 u_1 V_1 = u_1 M_1 = u_1\frac{1}{2}(M_K + M_D + M_A + M_E) \tag{4-8-29}$$

第二项由(4-8-17)式得



图 4-8-4　围绕格点的四边形取法

a. 取四格格心作四边形顶点；　b. 取四格对角线作四边形的边

$$\int \rho u(u-D)\cdot n ds = \frac{\pi}{2}\sum_{l=1}^{4}(\rho u)_{2l,2(l+1)}[(v_{2l}+v_{2(l+1)}-D_{z,2l}-D_{z,2(l+1)})\cdot(r_{2(l+1)}-r_{2l}) - (u_{2l}+u_{2(l+1)}-D_{r,2l}-D_{r,2(l+1)})\cdot(z_{2l+2}-z_{2l})] \times (r_{2(l+1)}+r_{2l}) \tag{4-8-30}$$

上式中$(\rho u)_{2l,2(l+1)}$的取法：

$$(\rho u)_{2l,2(l+1)} = \rho_{l''}\left[\frac{1}{2}(1+A_{2l,2(l+1)})u_1 + \frac{1}{2}(1-A_{2l,2(l+1)})u_{2l+1}\right] \tag{4-8-31}$$

式中 $l=1, 2, 3, 4$，$l''=K, D, E, A$，且

$$A_{2l,2(l+1)} = a'\mathrm{sgn}W_{2l,2(l+1)} + b'\frac{(WS)_{2l,2(l+1)}\Delta t}{V_{l''}} \tag{4-8-32}$$

若采用 DC 法，则 $a'=1$，$b'=0$，例如 $w_{2l,2(l+1)}>0$，$l=1$ 时对应 R_2R_4 边，取 u_1，$\rho_{l''}=\rho_k$.

式(4-8-4)中右边项

$$\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial P}{\partial z}\mathrm{d}V = \iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial P}{\partial z}2\pi r\mathrm{d}z\mathrm{d}r = 2\pi\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial Pr}{\partial z}\mathrm{d}z\mathrm{d}r \tag{4-8-33}$$

若为矩形网格，如图 4-8-5 所示，则有

$$\frac{\partial Pr}{\partial z} = \frac{(Pr)_2-(Pr)_1}{\Delta z} \tag{4-8-34}$$

而对于任意形状的四边形网格，r 是变化的，所以对偏导数求差分时，将产生误差，因此化为线积分来计算，设有 $\phi=(\phi_1,\phi_2)$，则

$$\iint \mathrm{div}\phi\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \iint\left(\frac{\partial\phi_1}{\partial x}+\frac{\partial\phi_2}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \oint(\phi_1\mathrm{d}y-\phi_2\mathrm{d}x) \tag{4-8-35}$$

若 $\phi_2=0$，则 $\iint\frac{\partial\phi_1}{\partial x}\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \oint\phi_1\mathrm{d}y$

若 $\phi_1=0$，则 $\iint\frac{\partial\phi_2}{\partial y}\mathrm{d}x\mathrm{d}y = -\oint\phi_2\mathrm{d}x$

在这里令 $\phi_1=Pr$，$\phi_2=0$，因此

$$2\pi\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial}{\partial z}(Pr)\mathrm{d}z\mathrm{d}r = 2\pi\int_{\partial\mathscr{D}_1(t)}Pr\mathrm{d}r$$

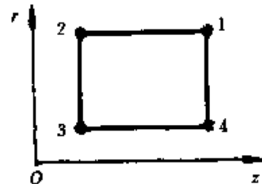


图 4-8-5　矩形网格情况

$$= 2\pi\sum_{l=1}^{4}(Pr)_{2l,2(l+1)}(r_{2(l+1)} - r_{2l})$$

$$= \pi\sum_{l=1}^{4}P_{l'}(r_{2(l+1)}^2 - r_{2l}^2) \tag{4-8-36}$$

式中

$$r_{2l,2(l+1)} = \frac{1}{2}(r_{2l} + r_{2(l+1)}) \tag{4-8-37}$$

$$P_{l'} = P_{2l,2(l+1)} \tag{4-8-38}$$

同样有

$$\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial P}{\partial r}\mathrm{d}V = \iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial P}{\partial r}2\pi r\mathrm{d}z\mathrm{d}r$$

$$= 2\pi\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\left[\frac{\partial}{\partial r}(Pr) - P\right]\mathrm{d}z\mathrm{d}r$$

$$= -2\pi\int_{\partial\mathscr{D}_1(t)}Pr\mathrm{d}z - 2\pi\iint_{\mathscr{D}_1(t)}P\mathrm{d}z\mathrm{d}r$$

$$= -\pi\sum_{l=1}^{4}P_{l''}(r_{2l} + r_{2(l+1)})(z_{2(l+1)} - z_{2l}) - 2\pi\sum_{l=1}^{4}P_{l''}V_{1,2l,2(l+1)} \tag{4-8-39}$$

式中 $l=1, 2, 3, 4, l''=K, D, E, A$，对应的 V 为

$$V_{1,2l,2(l+1)} = \Delta_{1,2,4}, \Delta_{1,4,6}, \Delta_{1,6,8}, \Delta_{1,8,2}.$$

若把 r 当作常数 r_1，则

$$\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial P}{\partial r}\mathrm{d}V = 2\pi r_1\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial P}{\partial r}\mathrm{d}r\mathrm{d}z$$

$$= -2\pi r_1\int_{\partial\mathscr{D}_1(t)}P\mathrm{d}z = -2\pi r_1\sum_{l=1}^{4}P_{l'}(z_{2(l+1)} - z_{2l}) \tag{4-8-40}$$

4.8.4 计算步骤

(1) 压力效应计算(相当于纯拉氏计算)

由动量方程得

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\rho v\mathrm{d}V = -\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\frac{\partial P}{\partial z}\mathrm{d}V \tag{4-8-41}$$

由(4-8-41)式左边得

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}_1(t)}\rho v\mathrm{d}V = (\rho v)_1^n\frac{\tilde{v}_1 - v_1^n}{\Delta t} = M_1^n\frac{\tilde{v}_1 - v_1^n}{\Delta t} \tag{4-8-42}$$

式中

$$M_1^n = \frac{1}{2}(M_K + M_D + M_E + M_A)^n \tag{4-8-43}$$

所以根据(4-8-36)式可以得到

$$\tilde{v}_1 = v_1^n - \frac{\Delta t\pi}{M_1^n}\sum_{l=1}^{4}P_{l'}(r_{2(l+1)}^2 - r_{2l}^2) \tag{4-8-44}$$

同样由(4-8-40)式可得

$$\tilde{u}_1 = u_1^n - \frac{\Delta t 2\pi r_1}{M_1^n}\sum_{l=1}^{4} P_{l'}(z_{2(l+1)} - z_{2l}) \tag{4-8-45}$$

由内能形式的能量方程(4-8-5)式有

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}(t)} \rho e \mathrm{d}V = -\iint_{\mathscr{D}(t)} P \mathrm{div}\boldsymbol{u} \mathrm{d}V \tag{4-8-46}$$

由(4-8-13)式和(4-8-28)式得

$$\tilde{e}_K = e_K^n - \frac{\Delta t}{M_K^n}\frac{\pi P_K^n}{2}\sum_{l=1}^{4}[(v_l + v_{l+1})(r_{l+1} - r_l) - (u_l + u_{l+1})(z_{l+1} - z_l)]^n (r_l + r_{l+1})^n \tag{4-8-47}$$

(2) 求网格密度 $\tilde{\rho}_{l'}$

结点坐标为

$$\left.\begin{aligned}\tilde{z}_1 &= z_1^n + \frac{1}{2}(v_1^n + \tilde{v}_1)\Delta t\\ \tilde{r}_1 &= r_1^n + \frac{1}{2}(u_1^n + \tilde{u}_1)\Delta t\end{aligned}\right\} \tag{4-8-48}$$

然后根据 $\tilde{z}_1$，$\tilde{r}_1$ 计算各格子体积 $\tilde{V}_{l'}$ 方法和 2DL 求体积的方法一样，所以密度为

$$\tilde{\rho}_{l'} = M_{l'}^n / \tilde{V}_{l'} \tag{4-8-49}$$

(3) 重分网格

重分网格的目的是为了防止网格扭曲、格边相交. 不要等到变形很大时再重分，应当每算完一步就重分，当然这样就使机时大为增加. 重分的原则是：

① 网格尽量正交；

② 网格尽量均匀；

③ 使输运量小一些，即使

$$(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{D}) \cdot \boldsymbol{n} = W \text{ 小一些.}$$

例如，一个简便的方法是将两组格边调直，如图 4-8-6 所示，然后取中点联成格边. 重分后再计算 z_1^{n+1}，r_1^{n+1}，$V_{l'}^{n+1}$. 在实际计算中，重分网格是很复杂的.

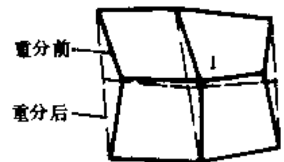


图 4-8-6　重分网格的简便方法

(4) 输运计算

因为节点 1 的速度为

$$\boldsymbol{D}_1^{n-1} = \left[\frac{z_1^{n+1} - z_1^n}{\Delta t}, \frac{r_1^{n+1} - r_1^n}{\Delta t}\right] \tag{4-8-50}$$

由(4-8-2)式有

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}(t)} \rho \mathrm{d}V = -\int_{\mathscr{D}(t)} \rho W \mathrm{d}S \tag{4-8-51}$$

由(4-8-17)式得

$$\begin{aligned}M_K^{n+1} = M_K^n - \frac{\pi\Delta t}{2}\sum_{l=1}^{4}\tilde{\rho}_{l,l+1}[(\tilde{v}_l + \tilde{v}_{l+1} - D_{z,l}^{n+1} - D_{z,l+1}^{n+1})(r_{l+1} - r_l)^{n+1}\\ - (\tilde{u}_l + \tilde{u}_{l+1} - D_{r,l}^{n+1} - D_{r,l+1}^{n+1})(z_{l+1} - z_l)^{n+1}](r_l + r_{l+1})^{n+1}\end{aligned} \tag{4-8-52}$$

所以

$$\rho_K^{n+1} = M_K^{n+1} / V_K^{n+1} \tag{4-8-53}$$

由动量方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}(t)}\rho f\mathrm{d}V+\int_{\partial\mathscr{D}(t)}\rho fW\mathrm{d}S=0 \tag{4-8-54}$$

式中第一项由(4-8-42)式得

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}(t)}\rho f_1\mathrm{d}V=\frac{1}{\Delta t}(M_1^{n+1}v_1^{n+1}-M_1^n\tilde{v}_1) \tag{4-8-55}$$

其中

$$M_1^{n+1}=\frac{1}{2}(M_K+M_D+M_E+M_A)^{n+1} \tag{4-8-56}$$

(4-8-54)式第二项由(4-8-30)式得

$$\begin{aligned}\int_{\partial\mathscr{D}(t)}\rho fW\mathrm{d}s=&\sum_{l=1}^{4}\rho vWS\\=&\frac{\pi}{2}\sum_{l=1}^{4}(\tilde{\rho}\tilde{f})_{2l,2(l+1)}[(\tilde{v}_{2l}+\tilde{v}_{2(l+1)}-D_{z,2l}^{n+1}-D_{z,2(l+1)}^{n+1})(r_{2(l+1)}-r_{2l})^{n+1}\\&-(\tilde{u}_{2l}+\tilde{u}_{2(l+1)}-D_{r,2l}^{n+1}-D_{r,2(l+1)}^{n+1})(z_{2(l+1)}-z_{2l})^{n+1}](r_{2(l+1)}-r_{2l})^{n+1}\end{aligned} \tag{4-8-57}$$

由(4-8-55)式(4-8-57)式就可求得 v_1^{n+1}，同样将 f 换成 u，就可求得 u_1^{n+1}. 下面求 e^{n+1}和 P^{n+1}.

由(4-8-5)式有

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}(t)}\rho e\mathrm{d}V+\int_{\partial\mathscr{D}(t)}\rho eW\mathrm{d}s=0 \tag{4-8-58}$$

第一项为

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_{\mathscr{D}(t)}\rho e\mathrm{d}V=\frac{1}{\Delta t}(e_K^{n+1}M_K^{n+1}-\tilde{e}_KM_K^n) \tag{4-8-59}$$

第二项

$$\begin{aligned}\int_{\partial\mathscr{D}(t)}\rho eW\mathrm{d}s=&\sum_{l=1}^{4}(\rho^{n+1}\tilde{e})_{l,l+1}W_{l,l+1}^{n+1}S_{l,l+1}^{n+1}\\=&2\rho_K^{n+1}\tilde{e}_K+\sum_{l,l'=1}^{4}\left[\frac{1}{2}\rho_{l'}^{n+1}\tilde{e}_{l'}-\frac{(W^2S^2)_{l,l+1}^{n+1}(\rho_{l'}^{n+1}\tilde{e}_{l'}-\rho_K^{n+1}\tilde{e})}{V_K^{n+1}+V_{l'}^{n+1}}\Delta t\right]\end{aligned} \tag{4-8-60}$$

对于 K 格的 ρe 用线性插值来确定，所以由(4-8-59)、(4-8-60)式就可得

$$e_K^{n+1}=\tilde{e}_K\frac{M_K^n}{M_K^{n+1}}-\frac{\Delta t}{M_K^{n+1}}\left\{2\rho_K^{n+1}\tilde{e}_K+\sum_{l,l'=1}^{4}\left[\frac{1}{2}\rho_{l'}^{n+1}\tilde{e}_{l'}-\frac{(W^2S^2)_{l,l+1}^{n+1}(\rho_{l'}^{n+1}\tilde{e}_{l'}-\rho_K^{n+1}\tilde{e}_K)\Delta t}{V_0^{n+1}+V_{l'}^{n+1}}\right]\right\} \tag{4-8-61}$$

压力由状态方程确定

$$P^{n+1}=P(\rho^{n+1},e^{n+1}) \tag{4-8-62}$$

至此，$n+1$ 时刻的量已全部求出.

4.8.5 边界条件

对称轴：法向速度为零，所以输运量为零.

真空边界：建立虚拟网格，如图 4-8-7 所示，E，A 格中 P，ρ，M 均为零，建立虚格的原则

是点 8 和点 4 镜象对称，即

$$\begin{cases} z_8 = z_4 \\ r_8 = r_4 + 2(r_1 - r_4) \end{cases} \tag{4-8-63}$$

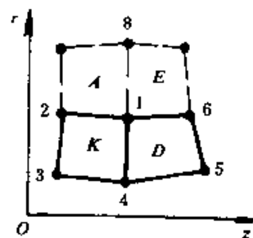


图 4-8-7　真空边界的虚拟网格

所以

$$M_1 = \frac{1}{2}(M_K + M_D)$$

由(4-8-44)式得

$$\tilde{v}_1 = v_1^n - \frac{\pi \Delta t}{M_1^n}[P_K(r_4^2 - r_2^2) + (P_D(r_6^2 - r_4^2)] \tag{4 8 64}$$

依此类推.

§4.9　材料动态断裂的数值模拟

材料在高加载率作用下的损伤断裂过程是十分复杂的，由于加载方式不同，材料微结构的不同，因而产生了各种各样的断裂现象，大体上可分为拉伸断裂和剪切断裂两大类. 拉伸断裂主要是拉伸应力引起的，剪切断裂主要是由剪切应力引起的. 在此仅讨论拉伸断裂.

大量实验观测表明[23, 24, 25]，材料中的断裂是由微孔洞(或微裂纹)的形核、增长和聚合形成宏观裂纹，这样一连串的事件组成的一个过程. 影响材料断裂过程的因素很多，对于动态断裂，还要考虑应变率、惯性效应以及由高速塑性形变引起的温度效应. 近年来，不少学者提出了各种动态断裂模型，但迄今并没有一个公认的完善模型，仍处于百家争鸣阶段. 王泽平等人[25, 26, 27]采用细观动力学方法，提出了自己的延脆性动态断裂模型，并将模型运用于数值模拟，计算结果与实验吻合较好. 材料的拉伸断裂根据细观机制大体可分为延性和脆性断裂两大类. 延性断裂过程为：微孔洞(量级为 1～100μm)的形核，增长和聚合. 脆性断裂过程为：微裂纹的形核、扩展、形成碎片和聚合形成宏观裂纹. 值得一提的是，在不同的加载率下，有些材料呈现不同的断裂微观机制.

4.9.1　脆性材料

脆性材料的动态断裂过程首先是形成微裂纹核，然后是微裂纹成长、形成碎片，聚合成宏观裂纹. Seaman[28]等人用材料的单位体积中微裂纹数 N 和微裂纹平均半径 R 来描述脆性材料的损伤过程. 王泽平在 Perzyna[29]模型的基础上，参考 Seaman 的实验结果，提出了一个简化脆性断裂模型如下[27].

用单位体积中的总裂纹体积来衡量损伤程度，取损伤度 ϕ 定义为，

$$\phi = ANR^3 \qquad 0 \leqslant \phi < 1 \tag{4-9-1}$$

式中 A 为与微裂纹形状有关的常数. 设材料为弹性理想塑性材料，假设损伤度变化率 $\dot{\phi}$ 由形核和增长两部分组成，即

$$\dot{\phi} = \dot{\phi}_n + \dot{\phi}_g \tag{4-9-2}$$

式中 $\dot{\phi}_n$ 为新的微裂纹形核对 $\dot{\phi}$ 的贡献，$\dot{\phi}_g$ 为已出现的微裂纹扩展时对 $\dot{\phi}$ 的贡献. 考虑扩展时，

取 N 为常数.

$$\dot{\phi}_n \sim \dot{N} \tag{4-9-3}$$

$$\dot{\phi}_g = \begin{cases} \dfrac{3(\sigma - \sigma_g)\phi}{\eta} & \sigma > \sigma_g \\ 0 & \sigma \leqslant \sigma_g \end{cases} \tag{4-9-4}$$

式中 σ 为等效拉伸应力,σ_g 为微裂纹扩展应力临界值,η 为材料的粘性系数. 由 Seaman 的实验结果有:

$$\dot{N} \sim \exp\left(\frac{\sigma - \sigma_N}{A_2}\right) - 1 \qquad \sigma > \sigma_N \tag{4-9-5}$$

式中 σ_N 为微裂纹形核应力临界值,A_2 为材料参数. 经过一些推导 ϕ 的演化方程:

$$\dot{\phi} = B(\sigma - \sigma_N) + \frac{3(\sigma - \sigma_g)\phi}{\eta} \tag{4-9-6}$$

采用 Rajendran[30]的方法求 σ_N 得

$$\sigma_N = \frac{1}{2}\rho C \Delta v \tag{4-9-7}$$

式中 ρ 为材料的密度,C 为声速,Δv 为自由面回跳速度,由实验测定. 一般可取 $\sigma_g = \sigma_N$,η 为材料已知值,B 为可由计算机试算来确定的常数. 下面介绍一维层裂数值模拟.

一、一维基本方程

$$\frac{1}{r^{\beta-1}} \frac{\partial(r^{\beta-1}u)}{\partial r} = \frac{\dot{\rho}}{\rho} \tag{4-9-8}$$

$$\rho\dot{U} = \frac{\partial\sigma_r}{\partial r} + (\beta - 1)\frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} \tag{4-9-9}$$

$$\rho\dot{E} = (P + q)\frac{\dot{\rho}}{\rho} + [S_1 \dot{\epsilon}_1 + (\beta - 1)S_2 \dot{\epsilon}_2] \tag{4-9-10}$$

其中 $\beta = \begin{cases} 1 & \text{平面情形} \\ 3 & \text{柱对称情形} \\ 3 & \text{球对称情形} \end{cases}$

式中 r 为 Euler 坐标,U 为质点速度,E 为内能,P 为静水压力,q 为人工粘性,ϵ_i,$S_i (i=1, 2)$ 分别为应变分量和应力偏量分量.

二、基本关系

(1) 应力应变关系

$$\dot{S}_i = 2\mu\left(\dot{\epsilon}_i + \frac{\dot{\rho}}{\rho}\right) \qquad (i = 1,2,3) \tag{4-9-11}$$

式中 μ 为剪切模量.

(2) 状态方程

我们采用 Grüneison 状态方程的形式

$$P = P_H + \Gamma_s P_s (E - E_H) \tag{4-9-12}$$

其中 $P_H = \dfrac{C_0^2 \rho_s \eta_s}{(1 - S_s)^2}$、$E_H = E_0 + \dfrac{(P_H + P_0)\eta_s}{2\rho_0}$,$\eta_s = 1 - V_s$

假设 $\Gamma_s \rho_s \approx \Gamma_0 \rho_0$,带有下标"$s$"的量为基体材料的量,$\Gamma_0$,$\rho_0$,$C_0$,$S_s$ 为基体的材料常数,V_s 为基体的相对比容.

(3) 人工粘性

我们采用一次粘性和二次粘性组合的形式

$$q=\begin{cases}\dfrac{C_L a\rho_0\Delta r}{V}\left|\dfrac{\partial U}{\partial r}\right|+\dfrac{C_0^2\rho_0(\Delta r)^2}{V}\left|\dfrac{\partial U}{\partial r}\right|^2 & \dfrac{\partial U}{\partial r}<0\\ 0 & \dfrac{\partial U}{\partial r}\geqslant 0\end{cases}\tag{4-9-13}$$

式中 C_L, C_0 为常数,取 $C_L=0.5$,$C_0=2$,a 为局部声速,V 为宏观相对比容.

三、差分格式

采用文[15]中的 Lagrange 计算方法. 对于质点坐标,速度取在网格结点上,对于内能、应力应变和其它力学量取在网格中心. n 为时间循环变量,j 为空间循环变量. 其计算差分格式为:

(1) 运动方程

对于网格结点的速度在(n, j)点作中心差分

$$U_j^{n+\frac{1}{2}}=U_j^{n-\frac{1}{2}}+\frac{\Delta t^n}{\phi_j^n}\left[(\sigma_r)_{j+\frac{1}{2}}^n-(\sigma_r)_{j-\frac{1}{2}}^n\right]+\Delta t^n D_j^n(\beta-1)\tag{4-9-14}$$

其中

$$\Delta t^n=\frac{1}{2}(\Delta t^{n+\frac{1}{2}}+\Delta t^{n-\frac{1}{2}}),$$

$$\Delta t^{n-\frac{1}{2}}=t^n-t^{n-1},$$

$$\Delta t^{n+\frac{1}{2}}=t^{n+1}-t^n,$$

$$\Phi_j^n=\frac{1}{2}\left[(\rho_0)_{j+\frac{1}{2}}\frac{r_{j+1}^n-r_j^n}{V_{j+\frac{1}{2}}^n}+(\rho_0)_{j-\frac{1}{2}}\frac{r_j^n-r_{j-1}^n}{V_{j-\frac{1}{2}}^n}\right],$$

$$D_j^n=\frac{1}{2}\left\{\left[\frac{(\sigma_r)_{j+\frac{1}{2}}^n-(\sigma_\theta)_{j+\frac{1}{2}}^n}{\frac{1}{2}(r_{j+1}^n+r_j^n)}\right]\left(\frac{V^n}{\rho_0}\right)_{j+\frac{1}{2}}+\left[\frac{(\sigma_r)_{j-\frac{1}{2}}^n-(\sigma_\theta)_{j-\frac{1}{2}}^n}{\frac{1}{2}(r_{j+1}^n+r_j^n)}\right]\left(\frac{V^n}{\rho_0}\right)_{j-\frac{1}{2}}\right\}\tag{4-9-15}$$

(2) 求网格结点的坐标

在($n+\frac{1}{2}$,j)点作差分

$$r_j^{n+1}=r_j^n+U_j^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}}\tag{4-9-16}$$

(3)连续方程

在($n+\frac{1}{2}$, $j+\frac{1}{2}$)点作差分

$$V_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}=V_{j+\frac{1}{2}}^n+\Delta t^{n+\frac{1}{2}}\left(\frac{\rho_0}{\Delta m}\right)_{j+\frac{1}{2}}\left[U_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}(r_{j+1}^{n+\frac{1}{2}})^{\beta-1}-U_j^{n+\frac{1}{2}}(r_j^{n+\frac{1}{2}})^{\beta-1}\right]\tag{4-9-17}$$

其中:Δ_m 为网格中的质量

(4) 应力偏量

在($n-\frac{1}{2}$, $j+\frac{1}{2}$)点作差分

$$(S_1)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}=(S_1)_{j+\frac{1}{2}}^n+2\mu\left[(\dot{\epsilon}_1)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}}-\frac{1}{3}\frac{V_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}-V_{j+\frac{1}{2}}^n}{V_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}\right]\tag{4-9-18}$$

$$(S_2)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}=(S_2)_{j+\frac{1}{2}}^n+2\mu\left[(\dot{\epsilon}_2)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}\Delta t^{n+\frac{1}{2}}-\frac{1}{3}\frac{V_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}-V_{j+\frac{1}{2}}^n}{V_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}\right]\tag{4-9-19}$$

$$(S_3)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}=-\left[(S_1)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}+(S_2)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}\right]\tag{4-9-20}$$

其中

$$(\dot{\epsilon}_1)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}=\frac{U_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}-U_j^{n+\frac{1}{2}}}{r_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}-r_j^{n+\frac{1}{2}}}$$

$$(\dot{\epsilon}_2)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}=\frac{U_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}+U_j^{n+\frac{1}{2}}}{r_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}+r_j^{n+\frac{1}{2}}}\tag{4-9-21}$$

(5) 人工粘性

在$(n+½, j+½)$点作差分

$$q^{n+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}}\begin{cases}C_L\left(\frac{a\rho_0}{V}\right)^{n+½}_{j+½}|U^{n+½}_{j+1}-U^{n+½}_{j}|+C_0^2\left(\frac{\rho_0}{V}\right)^{n+½}_{j+½}|U^{n+½}_{j+1}-U^{n+½}_{j}|^2 & U^{n+½}_{j+1}<U^{n+½}_{j}\\0 & U^{n+½}_{j+1}\geqslant U^{n+½}_{j}\end{cases}$$

(4-9-22)

(6) 能量方程

在$(n+½, j+½)$点作差分

$$E^{n+1}_{j+½}=\frac{(\rho_0)_{j+½}E^n_{j+½}-\left[\frac{1}{2}(A^{n+1}_{j+½}+P^n_{j+½})+q^{n+½}_{j+½}\right](V^{n+1}_{j+½}-V^n_{j+½})+dE_1+dE_2}{(\rho_0)_{j+½}+\frac{1}{2}B^{n+1}_{j+½}(V^{n+1}_{j+½}-V^n_{j+½})}\quad(4\text{-}9\text{-}23)$$

其中 $dE_1=V^{n+½}_{j+½}(S_1)^{n+½}_{j+½}(\dot{\epsilon}_1)^{n+½}_{j+½}\Delta t^{n+½}$,

$dE_2=(\beta-1)V^{n+½}_{j+½}(S_2)^{n+½}_{j+½}(\dot{\epsilon}_2)^{n+½}_{j+½}\Delta t^{n+½}$,

四、计算中的一些处理

(1) 损伤度ϕ将使材料性能改变,为此引入函数F

$$F=1-\left(\frac{\phi}{\phi_{crit}}\right)^m\quad(4\text{-}9\text{-}24)$$

式中ϕ_{crit}是断裂临界值,当$\phi\geqslant\phi_{crit}$时$F=0$,网格发生断裂,令网格各力学量为零,由回收试件的细观观测确定ϕ_{crit}值.式中m为常数,在此取$m=1$.材料屈服强度Y、剪切模量μ和体模量K由下式确定

$$Y=FY_s$$
$$\mu=F\mu_s\quad(4\text{-}9\text{-}25)$$
$$K=FK_s$$

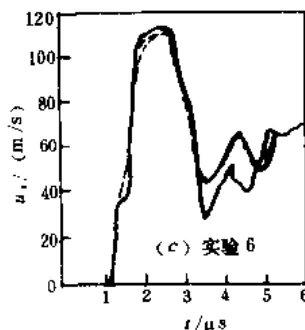
式中下标"s"为无损伤材料常数.

(2) 损伤材料静水压P由下式求得[31]

$$P=(1-\phi)P_s[(1-\phi)V, E]\quad(4\text{-}9\text{-}26)$$

式中P_s为无损伤时材料的静水压力.

(3) t^{n+1}时刻的ϕ^{n+1}值可以由(4-9-6)式用龙格—库塔法解得.



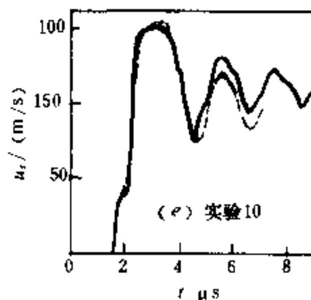


图 4-9-1 铀层裂数值模拟与实验结果的比较

……实验;——Cochran 计算;---王泽平计算

五、计算结果:

用上述断裂模型对Cochran[32]文章中铀的层裂实验进行了数值模拟,实验条件见表4-9-1,材料参数见表4-9-2,计结果见图4-9-1,可见所提出的模型计算比Cochran的计算更符合实验结果.

表 4-9-1 实验条件[32]

实验号	飞片厚度(mm)	靶厚(mm)	碰撞速度(m/s)
6	2.268	4.527	0.114
10	3.026	6.016	0.153

表 4-9-2 材料参数[32]

材料	密度 g/cm³	屈服强度 GPa	剪切模量 GPa	成核应力 GPa	状态方程参数		
					C_0(km/s)	S	Γ_0
铀	19.04	0.9	88	2.4±0.1	2.48	1.53	2.42

4.9.2 延性材料

和脆性材料类似，延性材料动态断裂也经历微孔洞形核，增长和聚合形成宏观裂纹的过程. 王泽平在 Carroll 和 Holt[31] 以及 Johnson[33] 等人工作的基础上，提出了一个延性动态损伤断裂模型[25]. 模型中考虑了应变率效应和惯性效应对孔洞增长的影响.

采用细观分析的方法，取一球形实体内含一球形孔洞(图 4-9-2)，设该基本构元(简称基元)受外动态拉伸应力作用. 在孔洞损伤演化方程的推导过程中采用了以下假设：

(1) 基体塑性不可压缩，即塑性形变不引起体积的变化；

(2) 孔洞在增长过程中保持球形；

(3) 忽略弹性形变对孔洞增长的贡献.

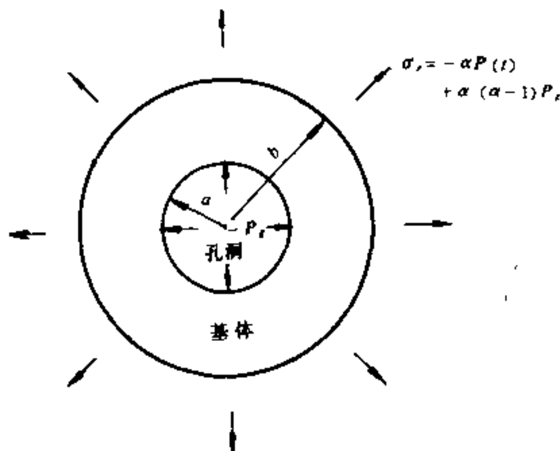


图 4-9-2 基本构元

以上三个假设在 Carroll[31] 和 Johnson[33] 的模型中都采纳过. 他们进行数值分析后发现，基体的弹性形变与后来的塑性形变相比，对孔洞增长的影响小得多，可以忽略不计. 同时，这种忽略给理论分析带来了很大的简化.

引入一损伤量——孔洞膨胀比 α，定义为

$$\alpha = V/V_s \tag{4-9-27}$$

式中 V 为基元体积，V_s 为基体体积. 经过一些推导[33]可得以下关于 α 的微分方程

$$\tau^2 Y_\theta Q(\alpha,\dot{\alpha},\alpha) = \alpha(P - P_g) - 2\int_a^b \frac{\sigma_\theta - \sigma_s}{r}\mathrm{d}r \tag{4-9-28}$$

式中

$$\tau^2 = \frac{\rho_s a_0^2}{3Y_0(\alpha_0 - 1)^{2/3}} \tag{4-9-29}$$

$$Q(\alpha, \dot{\alpha}, \alpha) = -\alpha[(\alpha-1)^{-1/3} - \alpha^{-1/3}] + \frac{1}{6}\dot{\alpha}^2[(\alpha-1)^{-4/3} - \alpha^{-4/3}] \tag{4-9-30}$$

这里"·"表示对时间求导，Y_0 为基体的初始屈服强度，P 是外加宏观拉伸应力，P_g 为孔洞内压力，σ_r 和 σ_θ 分别为主应力中的正应力和切应力，a_0 为初始的孔洞半径. α_0 为初始孔洞膨胀比，ρ_s 为基体密度.

基体采用与应变率相关的本构关系[31]

$$\sigma_r - \sigma_\theta = Y_0 + H\varepsilon^P + \eta\dot{\gamma}^P \tag{4-9-31}$$

式中，H 为材料的线性硬化系数，ε^P 这基体和等效塑性应变，η 为粘性系数，$\dot{\gamma}P$ 为基体的塑性剪应变率. 将(4-9-31)式代入(4-9-28)式可得

$$\tau^2\ddot{\alpha} + a_1(\alpha)(\dot{\alpha})^2 = -a_2(\alpha)\dot{\alpha} - a_3(\alpha) \tag{4-9-32}$$

式中

$$a_1(\alpha) = -\frac{\tau^2}{6}\left[1 + \left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right)^{1/3}\right]\left[1 + \left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right)^{2/3}\right] \tag{4-9-33}$$

$$a_2(\alpha) = \frac{\eta}{Y_0}\frac{2}{(\alpha_0-1)^{2/3}}\frac{1}{1-\left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right)^{1/3}} \tag{4-9-34}$$

$$a_3(\alpha) = \frac{(\alpha-1)^{1/3}}{1-\left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right)^{1/3}}\left\{\frac{P-P_g}{Y_0}\alpha - \frac{2}{3}\ln\frac{\alpha}{\alpha-1} - \frac{4}{3}\frac{H}{Y_0}\left[\left(\frac{\alpha}{\alpha_0}\right)^{1/3} - \left(\frac{\alpha_0-1}{\alpha-1}\right)^{1/3}\right]\right\} \tag{4-9-35}$$

(4-9-32)式左边项表示惯性效应对孔洞的阻碍作用. 前面指出过，在高加载率下，惯性效应不可忽略. 由于(4-9-32)式是关于孔洞膨胀比 α 的高非线性二阶常微分方程，难以得出解析解. 王泽平采用奇异摄动方法出了近似解[26]

$$\dot{\alpha}(\alpha, \varepsilon) = \dot{\alpha}^I(\alpha) + u(\zeta) \tag{4-9-36}$$

式中

$$\dot{\alpha}^I(\alpha) = -\frac{a_3(\alpha)}{a_2(\alpha)} \tag{4-9-37}$$

$$\zeta = \frac{\alpha - \alpha_0}{\tau^2} \tag{4-9-38}$$

函数 $u(\zeta)$ 称为奇异解，它描述惯性效应对孔洞动态增长的影响. $u(\zeta)$ 满足

$$u(\zeta) = ce^{[1-u(\zeta)/\dot{\alpha}^I(\alpha_0)]} \tag{4-9-39}$$

$$c = [\dot{\alpha}_0 - \dot{\alpha}^I(\alpha_0)]e^{[1-\dot{\alpha}_0/\dot{\alpha}^I(\alpha_0)]} \tag{4-9-40}$$

这里

$$\dot{\alpha}_0 = \dot{\alpha}(\alpha_0)$$

(4-9-36)式就是孔洞膨胀比 α 的演化方程.

与脆性材料类似，引入损伤度 Φ 来描述延性材料动态断裂. Φ 定义为

$$\Phi = \frac{V_v}{V} \tag{4-9-41}$$

式中 V_n 为基元中孔洞的体积. 同样假设损伤度变化率 $\dot{\Phi}$ 由两部分组成

$$\dot{\Phi} = \dot{\Phi}_n + \dot{\Phi}_g \tag{4-9-42}$$

Φ_g 与孔洞膨胀比 α 的关系由下式给出

$$\Phi_g = \frac{\alpha - 1}{\alpha} \tag{4-9-43}$$

孔洞形核对损伤度的贡献 $\dot{\Phi}_n$ 采用 chu 和 Needleman[34] 的结论：

$$\dot{\Phi}_n = A\left[\dot{\sigma}_m + \frac{1}{3}\dot{\sigma}_{kk}\right] \tag{4-9-44}$$

式中 σ_m 为基体的等效应力，$\frac{1}{3}\sigma_{KK}$ 为基体的平均应力.

$$A = \begin{cases} \dfrac{f_N}{s_N\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left[\frac{\sigma_m + \frac{1}{3}\sigma_{KK} - \sigma_N}{s_N}\right]^2}, & \sigma_m + \dfrac{1}{3}\sigma_{KK} - \sigma_N > 0 \\ 0, & \sigma_m + \dfrac{1}{3}\sigma_{KK} - \sigma_N \leqslant 0 \end{cases}$$

f_N 为成核粒子的体积因子，S_N 为相应的标准方差，σ_N 为成核应力临界值.

由于材料中微孔洞的存在，使材料参数发生变化，宏观剪切模量 μ 和屈服强度 Y 与损伤度中的关系为[33]

$$\mu = \mu_0(1-\Phi)\left[1 - \frac{6K_0 + 12\mu_0}{9K_0 + 8\mu_0}\Phi\right] \tag{4-9-45}$$

$$Y = (1-\Phi)Y_0 \tag{4-9-46}$$

式中 K_0，μ_0 和 Y_0 分别为没有损伤时材料的体模量、剪切模量和屈服强度.

断裂准则和计算中的一些处理，以及差分方程与脆性动态断裂数值模拟类似. 当 $\Phi \geqslant \Phi_{crit}$ 时，认为该网格发生断裂，Φ_{crit} 为材料的临界损伤度，由软回收试件的定量金相分析得到. 对于延性很好的材料，如纯铜、纯铝等，$\Phi_{crit} \approx 0.3$.

王泽平等利用上面提出的延性材料动态断裂模型对纯铜、LY12 铝合金等多种材料的一维和二维层裂实验进行了数值模拟[45]. 其中二维层裂计算采用的是 HEMP 程序的差分格式. 实验设计见图 4-9-3.

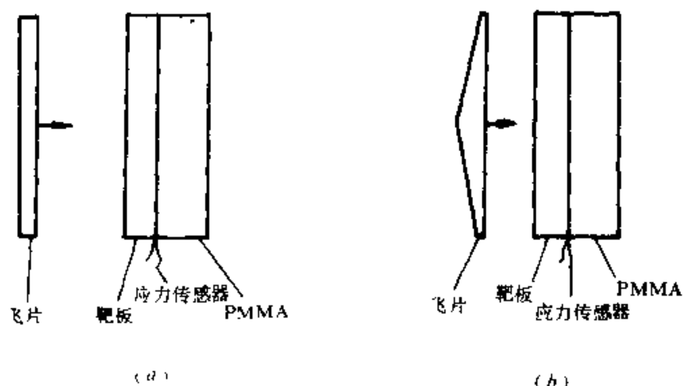


图 4-9-3 一维二维层裂实验设计简图

(a) 一维层裂； (b) 二维层裂

图 4-9-4 至图 4-9-7 给出了纯铜一维和二维计算结果与实验结果的比较. 图 4-9-8 给出了二维层裂数值模拟中，损伤在靶板内随时间的发展. 从图 4-9-8 很清楚地看到，损伤最开始在

靶板的边缘区域产生，然后向靶心扩展，最后形成锥形损伤区. 计算与实验的比较表明，王泽平等提出的延性材料动态断裂模型能较好地描述材料的拉伸断裂过程.

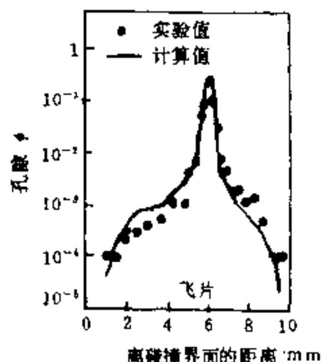


图 4-9-4　损伤度分布的数值模拟与实验结果比较

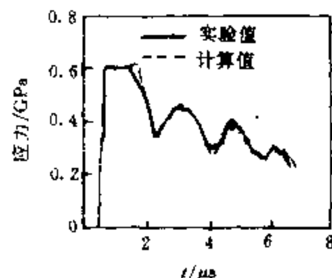


图 4-9-5　一维层裂靶背面应力数值模拟与实验结果比较

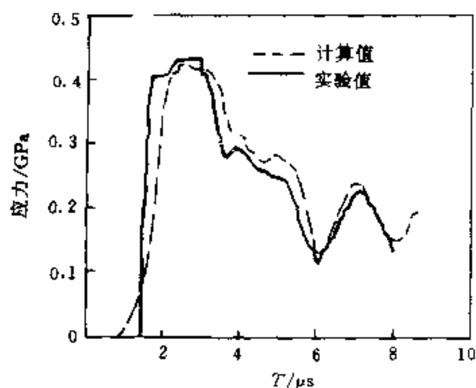


图 4-9-6　二维碰撞靶背面应力数值模拟与实验结果比较

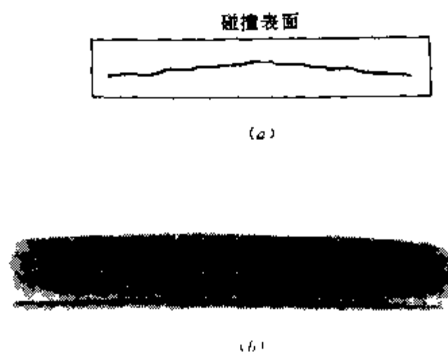


图 4-9-7　二维层裂面位置数值模拟与实验结果比较

(a) 数值模拟结果；(b) 实验结果

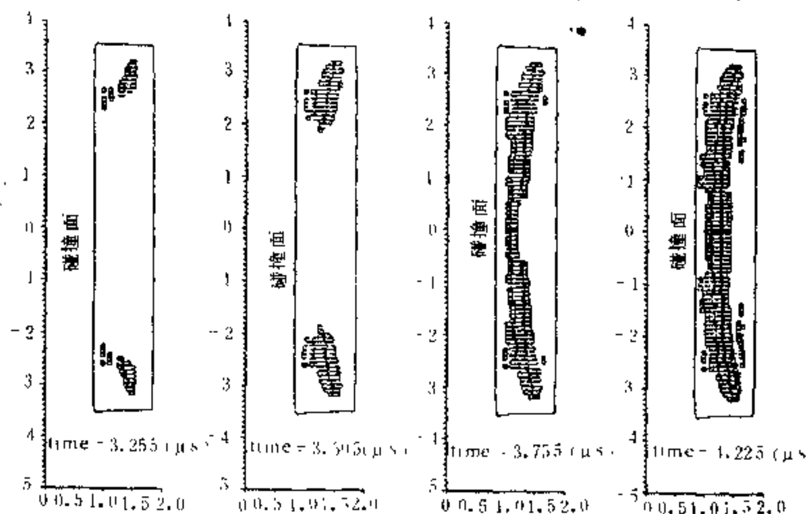


图 4-9-8　二维数值模拟给出的靶板中损伤(不是断裂)随时间的发展

参 考 资 料

[1] Amsden, A. A., Harlow, F. H., A simplified MAC Technique for Incompressible Fluid flow Calculations. J. Comp. Phys., Vol. 6, 1970, P. 322.

[2] Amsden, A. A. The Particle-in-Cell Method for the Calculation of the Dynanmics of Compressible Fluids. Los Alamos Scientific Laboratory Report, LA-3466, 1966.

[3] Lee, W. H., Kwark, D., Los Alamos Scientific Laboratory Report. LA-10857, 1988.

[4] Gentry, R. A., Martin, R. E., and Daly, B. J. An Eulerian Differencing Method for Unsteady Compersssible Flow Problems. J. Comp. Phys. Vol. 1, 1966, P. 87.

[5] Harlow, F. H., Amsden, A. A. Multifluid Flow Calculations at All Mach Numbers, J. Comp. Phys. Vol. 16, 1974, P. 1.

[6] Kershner, J. D., Mader, C. L. 2DE: A Two-dimensional continuous Eulerian Hydredynamic code for Computing Multicomponent Reactive Hydrodynamic Problems. Los Alamos Scientific Laboratory Report. LA-4846, 1972.

[7] 徐国荣,于志鲁,廖振民,袁仙寿,周淑荣. 多物质可压缩流体力学的欧拉力数值方法. 数值计算与计算机应用. 第一卷,1980, P. 163.

[8] 许寿榕,张华,彭金华. 斜侵彻数值模拟分析. 中国兵工学会第二届学术年会论文,1987.

[9] J. JHenrych. 爆炸动力学及其应用. 科学出版社,1987. PP. 126--127

[10] 李翼祺. 马素贞. 爆炸力学. 科学出版社,1992, P315.

[11] Hageman. L. J., Walsh, J. M. HELP: A Multi-material Eulerian Program for Compressible Fluid and Elastic-plastic Flows in Two Space Dimensions and Time. Ballistic Research Laboratories. Report 35R-350, 1971.

[12] Sedgwick, R. T., et al., Behavior and Utilization of Explosives in Engineering Design 12th Annual Symposium, 1972.

[13] 梁德寿,部分体积的计算和HELP程序的改进. 爆炸与冲击. Vol. 4, No. 1, 1984, P. 29.

[14] Hageman, L. J., Wilkins, D. E., Sedgwick, R. T., Waddell, J. L. HELP-A Multi-material Eulerian Program in Two Space Dimensions and Time. ADBO 15344, 1976.

[15] Wilkins, M. L. Calculation of Elastic-plastic Flow. Lawrence Livermore Laboratory. Report UCRL-7322, 1969.

[16] Johnson, J. N., Mader, C. L., Show, M. S. 2DL: A Lagrangian Two-Dimensional Finite-Difference Code for Reactive Media. Los Alamos Scientific Laboratory Report. LA-8922 M. 1981.

[17] Cochran, S. G., Chan, J. Shock Initiation and Detonation Models in One and Two Dimensions. UCLD-18024, 1979.

[18] Lee, E. L., Tarver, C. M. Phenomenological Model of Shock Initiation in Heterogeneous Explosives. Physics of Fluids 23(12) 1980. P. 2362.

[19] 章冠人,陈大年. 凝聚炸药起爆动力学. 北京:国防工业出版社,1991.

[20] Noh. W. F., CEL. A Time-dependent Two-space-dimensional Coupled Eulerian Lagrange Code. Methods in Computational Physics. vol. 3, 1964, Alder, Fernbach, Rotenberg. Eds.. Academic Press, New York. P. 117.

[21] Hirt, C. W., Amsden, A. A.. Cook, J. L. An Aabitrary Lagrangian-Eulerian Computing Method for All Flow Speeds. J. Comp. Phys., Vol. 14, 1974, P. 227.

[22] 李德元,徐国荣,水鸿寿,何高玉,陈光南,袁国兴. 二维非定常流体力学数值方法. 北京:科学出版社,1987.

[23] Curran, D. R. Seaman L. and Shockey. D. A. Physics Rep. Vol. 147. (1987) PP. 254--388.

[24] Meyers M. A. and Aimone, C. T. Proceedings Material Science. Vol. 28 (1983). PP. 1—96.

[25] Wang. Z. P. Acta. Mechanica Solida Sinica (English Edition). Vol. 6(1), (1993), PP. 69 80.

[26] 王泽平,延性材料动态损伤研究. 北京理工大学博士学位论文,1991 年 10 月.

[27] Wang, Z. P. Huang F. L. and Yun, S. R. Acta. Mechanica Solida Sinica (English Edition). Vol. 5(1). 1992, PP. 13—26.

[28] Seaman. L. Curran D. R.. and Shockey. D. A. J. Appl. Phys. Vol. 52. (1985). PP. 593 600.

[29] Perzyna. P. Arch. Mech., Vol. 38, 5 6, Warszawa, (1956) 725.

[30] Rajendran, A. M. J. Appl. Phys.. Vol. 65(4), PP. 1521 1527. (1989).

[31] Carroll M. M. and Holt, A. C. J. Appl. Phys. Vol. 43, (1972), PP. 1626—1636.

[32] Cochran, S. et, al., J. Appl. Phys.. Vol. 48(7), (1977) 2729.

[33] Johnson, J. N. J. Appl, Phys.. Vol. 52(4), (1981). PP. 2812—2525.

[34] Chu C. C. and Needleman, A. J. Eng. Mat, Ted.. Vol. 102, (1980), PP. 249-256

第五章 有限元法

§5.1 前言

许多物理问题既可以化为微分方程的定解问题也可以归结为变分问题。从前者出发形成了解析法及有限差分法，以后者为基础则形成了 Ritz 法和有限元法。

解析法是对微元体进行几何及力学分析，并使微元的体积趋于零而得到偏微分方程组，然后在一定的条件下用严格的数学方法求解偏微分方程组得到解析解。解析解是精确解，但能够得到解析解的实际问题实在是太少了，有限差分法正是为了解决这一问题而发展起来的，它以差商代替偏导数将编微分方程组离散化得到差分方程组，并通过解差分方程组得到偏微分方程组的近似解。

变分法是求泛函极值的问题，可以证明线弹性连续体变形问题的泛函是整个弹性体的总势能 $\Pi=U-W$，其中 U 为弹性体的应变能、W 是荷载势能。在系统处于平衡时总势能应取极值，即其变分 $\delta\Pi=0$

从虚位移原理可以推出上面的结论。虚位移原理是说物体处于平衡的条件是：对于强加在该物体上的任意相容的微小虚位移，总的内虚功应等于总的外虚功，即

$$\int_V \boldsymbol{\varepsilon}^{*T}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{d}V = \int_V \boldsymbol{U}^{*T}\boldsymbol{f}^B\mathrm{d}V + \int_s \boldsymbol{U}^{s*T}\boldsymbol{f}^s\mathrm{d}s + \sum_i \boldsymbol{U}^{i*T}\boldsymbol{f}^i \tag{5-1-1}$$

其中黑体表示向量或矩除，$\boldsymbol{U}^*$ 表示虚位移，$\boldsymbol{\varepsilon}^*$ 为和虚位移相应的虚应变，上角标 T 表示转置矩阵，$\boldsymbol{f}^B$ 表示体积力，$\boldsymbol{U}^{s*}$ 表示表而虚位移，f^s 为表面分布载荷，$\boldsymbol{F}^i$ 表示第 i 个集中载荷，$\boldsymbol{U}^{i*}$ 是对应集中载荷的作用点的虚位移。

上式的左边是弹性连续体的应变能，或者说是实际应力向量 $\boldsymbol{\sigma}$ 在虚位移上所作的功。右边各项则分别为体积力。表而分布载荷及表面集中载荷在虚位移上所作的功。

假定该物体是线弹性的，而且假定虚位移是实际位移的变分，那么相应的虚应变就是实际应变的变分，于是有 $\boldsymbol{U}^*=\delta\boldsymbol{U}$，$\boldsymbol{\varepsilon}^*=\delta\boldsymbol{\varepsilon}$，$\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{D\varepsilon}$，其中 $\boldsymbol{D}$ 为弹性矩阵或称作本构矩阵。于是(5-1-1)式变成

$$\int_V \delta\boldsymbol{\varepsilon}^T\boldsymbol{D}\boldsymbol{\varepsilon}\mathrm{d}V = \int_V \delta\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{f}^B\mathrm{d}V + \int_s \delta\boldsymbol{U}^{sT}f^s\mathrm{d}s + \Sigma_i\delta\boldsymbol{U}^{iT}\boldsymbol{F}^i$$

考虑到 D 的对称性，上式变成

$$\delta\left\{\frac{1}{2}\int_V \boldsymbol{\varepsilon}^T\boldsymbol{D}\boldsymbol{\varepsilon}\mathrm{d}V\right\} = \delta\left\{\int_V \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{f}^B\mathrm{d}V + \int_s \boldsymbol{U}^{sT}\boldsymbol{f}^s\mathrm{d}s + \sum_i \boldsymbol{U}^{iT}\boldsymbol{F}^i\right\} \tag{5-1-2}$$

上式左边是线弹性连续体的应变能的变分，右边是荷载势能的变分，这就是总势能最小原理。

Ritz 法是求解变分问题的一种近似方法，这种方法是将无限维的连续体问题变成有限维的问题来求近似解。具体地说是要构造一串函数(称为 Ritz 函数)，解是这些函数的线性组合，系数则称为 Ritz 系数，将解的形式代入泛函并对 Ritz 系数变分，得到 Ritz 系数的解从而得到问题的近似解。

有限元法可以说是 Ritz 法的一种形式，但它对 Ritz 法有很多优点。Ritz 法在构造试探函

数(Ritz 函数)方面存在严重问题,由于在整个求解区域上利用充分光滑的函数逼近,当自由度增加时精度提高缓慢,对较复杂的多维区域构造这种试探函数往往很困难,甚至不可能。有限元法则不用充分光滑函数作试探函数,而是将求解区域划分成有限个单元,采用分片多项式构造的连续函数作试探函数。在应力、应变变化剧烈的地方可以通过加密网格的方法来提高精度。

同有限差分法相比,在有限元法中,由于用积分表达式代替了定解问题微分表达式,所以单元的划分远较差分法中的网格灵活,它可以用任意形状的网格来分割区域,可以根据需要自如地布置节点,对区域的形状有较好的适应性。有限元法的另一大优点是容易编制通用计算机程序。有限元法是随着计算机的出现而发展起来的,而有限元方法的研究和应用又反过来促进计算机科学的发展。

目前,有限元程序可以归结为结构有限元和动力有限元两大类,前者是在线弹性范围内求解静态应力。应变场或构件振动等动力过程,后者则涉及到塑性变形,甚至大塑性变形和大畸变问题。

在弹性范围内,由于应力和应变有一一对应关系,可以通过单元刚度矩阵把节点集中力和节点位移联系起来,并把单元刚度矩阵组合成总体刚度矩阵,得到总体的线性方程组,然后求解。而在塑性变形范围内,应力不仅同应变有关而且同应力历史有关,由于应力和应变没有一一对应关系,因而不能象在弹性范围内那样,通过单元刚度矩阵和总体刚度矩阵来求解,节点集中力是根据静力平衡的原理进行计算的,所以动力有限元同结构有限元既有相似之处,又有本质差别,它不是基于变分原理,而是介于有限差分和结构有限元之间的一种算法。

本章将在第二节中以三角形单元为例,对结构有限元作一简要介绍;第三节则根据三角形单元二维流体弹塑性程序 DEFEL,对动力有限元进行比较详细的讨论,第四节将对 DEFEL 程序的概貌及典型应用实例作些介绍和进行必要的分析,第五节介绍 DYNA 程序,它采用四节点单元,是应用较广泛的动力有限元程序。

§5.2 结构有限元简介[1~4]

5.2.1 结构有限元分析的步骤

用基于位移的有限元法求解连续线弹性体变形问题的步骤如下:

一、区域离散化

将求解区域用网格划分为单元,网格线的交点称作节点,相邻单元之间靠节点连在一起,节点是铰接点,只传递力分量。为了提高解的精度,在应力、应变变化剧烈的地方网格应稠密,反之则较稀。目前采用的单元类型有三角形、矩形、六节点三角形,任意四边形等参单元等。单元类型确定之后,就要选用相应的位移函数,例如对于三角形单元可以选用线性位移函数。

因为我们所要重点讨论的动力有限元程序 DEFEL 采用三角形单元,所以本章只讨论三角形单元一种情况。

二、单元分析

根据选定的位移函数计算单元的节点力同节点位移的关系、计算单元的刚度矩阵和节点载荷。这里所说的节点力是节点对单元的作用力,就整体而言是弹性体的内力。由于在有限元

法中只建立节点的平衡方程，所以需将单元中间及边界上的外载荷(包括惯性载荷)根据静力等效原则转化到节点上，称为节点载荷，对整体而言它是外载荷。单元的刚度矩阵则反映了节点位移列向量同节点载荷列向量之间的关系(以后讨论)。

值得指出的是，在单元分析中，节点位移被看作是已知的，而单元的位移则是由节点位移和位移函数的形式确定的，当然单元位移场在节点上的值应该同节点已知位移一致。

三、总体分析

由单元的刚度矩阵集合成总体的刚度矩阵，就得到结构的静态平衡方程组。如果载荷随时间变化则必须考虑惯性力，如果振动时有机械能损耗还必须引入阻尼。把惯性力和阻尼力同其他体力分开，单独列入平衡方程组，就得到了结构的动力平衡方程组。

在总体分析中节点位移是未知数，它们是平衡方程组的解。

四、求解平衡方程组

根据求得的总体刚度矩阵及载荷列向量可以求出静力问题的各节点的位移。

对动力平衡方程组的求解往往比静力的复杂得多。解法也很多，例如直接积分法，振型叠加法等。为便于以后同动力有限元对比，我们只对直接积分法中的中心差分法及其稳定性条件进行简单介绍。

五、计算单元的应变和应力

一旦求得各节点的位移，就可以按位移函数求得任一单元内任一点的位移，应变和应力。

5.2.2 单元分析

本节以平面问题及轴对称问题为例介绍单元分析过程，主要是如何建立单元刚度矩阵。

一、三角形的面积坐标

三角形单元被广泛采用，不仅是由于其形状简单，适应区域形状能力强，而且是由于采用面积坐标后其形状函数生成简单，容易标准化。

如图 5-2-1 所示，设三角形 ijm 的面积为 A。三角形内一点 $P(x,y)$ 同各顶点的连线将三角形的面积 A 分成三部分，分别为 A_i, A_j, A_m，则 P 点的面积坐标定义为

$$L_i=\frac{A_i}{A}, L_j=\frac{A_j}{A}, L_m=\frac{A_m}{A}$$

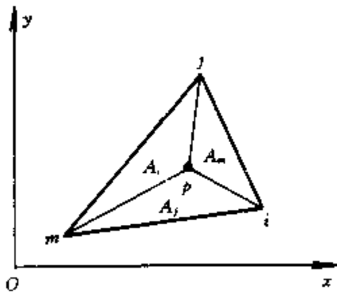


图 5-2-1 三角形的面积坐标

由定义显然有 $L_i+L_j+L_m=1$，而且很显然，面积坐标为局部坐标，它同整体坐标的关系为

$$L_i=\frac{A_i}{A}=\frac{1}{2A}\begin{vmatrix}1 & x & y\\ 1 & x_j & y_j\\ 1 & y_m & y_m\end{vmatrix}$$

$$=\frac{1}{2A}[(x_jy_m-x_my_j)+(y_j-y_m)x+(x_m-x_j)y]$$

$$=\frac{1}{2A}(a_i+b_ix+c_iy) \qquad (i,j,m) \qquad (5\text{-}2\text{-}1)$$

其中 $a_i=x_jy_m-y_jx_m$

$b_i=y_j-y_m$

$c_i=x_m-x_j$

将(5-2-1)式写成矩阵表达式则为

$$\begin{Bmatrix} L_i \\ L_j \\ L_m \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} a_i & b_i & c_i \\ a_j & b_j & c_j \\ a_m & b_m & c_m \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ x \\ y \end{Bmatrix} \tag{5-2-2}$$

其反变换表达式为

$$\begin{Bmatrix} 1 \\ x \\ y \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_i & x_j & x_m \\ y_i & y_j & y_m \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} L_i \\ L_j \\ L_m \end{Bmatrix} \tag{5-2-3}$$

(5-2-3)式的展开式为

$$\left.\begin{aligned} x &= L_i x_i + L_j x_j + L_m x_m \\ y &= L_i y_i + L_j y_j + L_m y_m \end{aligned}\right\} \tag{5-2-4}$$

即三角形内任一点的坐标可由三角形三个顶点的坐标进行插值,插值多项式是该点的面积坐标。

设函数 f 是面积坐标的函数,那么 f 对整体坐标 x,y 的求导公式为

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\partial f}{\partial L_i}\frac{\partial L_i}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial L_j}\frac{\partial L_j}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial L_m}\frac{\partial L_m}{\partial x} \\ &= \frac{b_i}{2A}\frac{\partial f}{\partial L_i} + \frac{b_j}{2A}\frac{\partial f}{\partial L_j} + \frac{b_m}{2A}\frac{\partial f}{\partial L_m} \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= \frac{c_i}{2A}\frac{\partial f}{\partial L_i} + \frac{c_j}{2A}\frac{\partial f}{\partial L_j} + \frac{c_m}{2A}\frac{\partial f}{\partial L_m} \end{aligned}\right\} \tag{5-2-5}$$

面积坐标的幂函数在三角形面积上的积分,可以采用下式

$$\iint_A L_i^a L_j^b L_m^c \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{a!b!c!}{(a+b+c+2)!}2A \tag{5-2-6}$$

面积坐标的幂函数在三角形某一边上的线积分为

$$\int_L L_i^a L_j^b \mathrm{d}s = \frac{a!b!}{(a+b+1)!}L \qquad (i,j,m) \tag{5-2-7}$$

从(5-2-6)式和(5-2-4)式可以得

$$\begin{aligned} \iint_A x\mathrm{d}x\mathrm{d}y &= \iint_A (L_i x_i + L_j x_j + L_m x_m)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \\ &= \frac{1}{3}(x_i + x_j + x_m)A \end{aligned} \tag{5-2-8}$$

二、平面问题单元分析

(1) 形状函数

在弹性平面问题中,每个节点有两个自由度,即 x 和 y 方向的位移 $u_i,v_i(i,j,m)$ 写成下面的形式

$$\boldsymbol{d} = [u_i \quad v_i \quad u_j \quad v_j \quad u_m \quad v_m]^T \tag{5-2-9}$$

相应的节点力分量列向量及载荷分量列向量为

$$\boldsymbol{F} = [F_{ix} \quad F_{iy} \quad F_{jx} \quad F_{jy} \quad F_{mx} \quad F_{my}]^T \tag{5-2-10}$$

$$\boldsymbol{R} = [R_{ix} \quad R_{iy} \quad R_{jx} \quad R_{jy} \quad R_{mx} \quad R_{my}]^T \tag{5-2-11}$$

如前所述,节点载荷是由作用在单元中间及边上的外载荷移置到节点上而产生的,下标 x,y 表示载荷分量的方向。

由于每个节点只有两个自由度，三个节点共有六个自由度，所以三角形单元只能采用线性函数作位移函数

$$\left.\begin{aligned} u &= a_1 + a_2 x + a_3 y \\ v &= a_4 + a_5 x + a_6 y \end{aligned}\right\} \tag{5-2-12}$$

六个待定常数 $a_1, a_2, \cdots\cdots, a_6$ 由六个节点位移分量来确定，即

$$\left.\begin{aligned} u_i &= a_1 + a_2 x_i + a_3 y_i \\ v_i &= a_4 + a_5 x_i + a_6 y_i \end{aligned}\right\} \quad (i, j, m) \tag{5-2-13}$$

解得的结果为

$$a_1 = \frac{1}{2A}\begin{vmatrix} u_i & x_i & y_i \\ u_j & x_j & y_j \\ u_m & x_m & y_m \end{vmatrix}, \qquad a_2 = \frac{1}{2A}\begin{vmatrix} 1 & u_i & y_i \\ 1 & u_j & y_j \\ 1 & u_m & y_m \end{vmatrix}$$

$$a_3 = \frac{1}{2A}\begin{vmatrix} 1 & x_i & u_i \\ 1 & x_j & u_j \\ 1 & x_m & u_m \end{vmatrix}$$

其中

$$A = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_m & y_m \end{vmatrix}$$

如果采用(5-2-1)式中的 a_i, b_i 和 c_i，那么可以写成

$$a_1 = \frac{1}{2A}(a_i u_i + a_j u_j + a_m u_m)$$

$$a_2 = \frac{1}{2A}(b_i u_i + b_j u_j + b_m u_m)$$

$$a_3 = \frac{1}{2A}(c_i u_i + c_j u_j + c_m u_m)$$

将此三式代入(5-2-13)式的第一式得

$$u = N_i(x \cdot y)u_i + N_j(x \cdot y)u_j + N_m(x \cdot y)u_m$$

其中

$$N_i = \frac{1}{2A}(a_i + b_i x + c_i y) \quad (i, j, m) \tag{5-2-14}$$

同理可以得到

$$v = N_i(x \cdot y)v_i + N_j(x \cdot y)v_j + N_m(x \cdot y)v_m$$

于是三角形单元的位移函数为

$$\left.\begin{aligned} u &= N_i u_i + N_j u_j + N_m u_m \\ v &= N_i v_i + N_j v_j + N_m v_m \end{aligned}\right\} \tag{5-2-15}$$

N_i, N_j, N_m 反映了单元内的点的位移同节点位移的关系，它们被称作为形状函数，是 x, y 的线性函数。

比较(5-2-1)式和(5-2-14)式可以知道，三角形单元内一点的形状函数值就是它的面积坐标，所以方程(5-2-6)，(5-2-7)和(5-2-8)式对形状函数同样是适用的。

由(5-2-14)式很容易求得形心的形状函数值为 $N_i = N_j = N_m = 1/3$，在节点 i 上 $N_i = 1, N_j = N_m = 0$，在 ij 边上 N_i 的值从 j 点的零线性地增加到 i 点的 1，且 $N_m = 0$

写成矩阵形式则单元的位移函数为

$$f = Nd \tag{5-2-16}$$

其中

$$f = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \tag{5-2-17}$$

$$N = \begin{bmatrix} N_i & 0 & N_j & 0 & N_m & 0 \\ 0 & N_i & 0 & N_j & 0 & N_m \end{bmatrix} \tag{5-2-18}$$

(2) 单元的应变和应力

应变列向量 $\varepsilon = [\varepsilon_x \ \varepsilon_y \ \gamma_{xy}]^T$ 可以写成

$$\varepsilon = Hf \tag{5-2-19}$$

其中微分符矩阵

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix}$$

将(5-2-16)式代入(5-2-19)式得

$$\varepsilon = H\,N\,d = B\,d \tag{5-2-20}$$

其中

$$B = H\,N = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_i & 0 & N_j & 0 & N_m & 0 \\ 0 & N_i & 0 & N_j & 0 & N_m \end{bmatrix}$$

0

c_m

b_m

$$= \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} b_i & 0 & b_j & 0 & b_m \\ 0 & c_i & 0 & c_j & 0 \\ c_i & b_i & c_j & b_j & c_m \end{bmatrix} \tag{5-2-21}$$

称为单元的几何矩阵，显然对于三角形单元 B 是常量矩阵，所以三角形单元是常应变单元。

如果 D 为弹性[本构]矩阵，则应力列向量为

$$\sigma = D\,\varepsilon = D\,B\,d = S\,d \tag{5-2-22}$$

其中

$$\sigma = [\sigma_x \ \sigma_y \ \tau_{xy}]^T$$

对于平面应力问题有

$$D = \frac{E}{1-\mu^2} \begin{bmatrix} 1 & \mu & 0 \\ \mu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\mu}{2} \end{bmatrix} \tag{5-2-23}$$

对于平面应变问题有

$$D = \frac{E(1-\mu)}{(1+\mu)(1-2\mu)}\begin{bmatrix} 1 & \frac{\mu}{1-\mu} & 0 \\ \frac{\mu}{1-\mu} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} \end{bmatrix} \tag{5-2-24}$$

其中 μ 为泊松比，E 为杨氏模量。

$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{DB}$，称作应力矩阵，从方程(5-2-23)和(5-2-24)式可以推出它的详细表达式。

对于平面应力问题有

$$S=\frac{E}{2A(1-\mu^2)}\begin{bmatrix} b_i & \mu c_i & b_j & \mu c_j & b_m & \mu c_m \\ \mu b_i & c_i & \mu b_j & c_j & \mu b_m & c_m \\ \frac{1-\mu}{2}c_i & \frac{1-\mu}{2}b_i & \frac{1-\mu}{2}c_j & \frac{1-\mu}{2}b_j & \frac{1-\mu}{2}c_m & \frac{1-\mu}{2}b_m \end{bmatrix} \tag{5-2-25}$$

对于平面应变问题有

$$S=\frac{E(1-\mu)}{2A(1+\mu)(1-2\mu)}\times$$

$$\begin{bmatrix} b_i & \frac{\mu}{1-\mu}c_i & b_j & \frac{\mu}{1-\mu}c_j & b_m & \frac{\mu}{1-\mu}c_m \\ \frac{\mu}{1-\mu}b_i & c_i & \frac{\mu}{1-\mu}b_j & c_j & \frac{\mu}{1-\mu}b_m & c_m \\ \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}c_i & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}b_i & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}c_j & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}b_j & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}c_m & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}b_m \end{bmatrix} \tag{5-2-26}$$

可见，对于平面应力和平面应变问题，三角形单元的应力矩阵 S 都是常量矩阵，所以三角形单元是常应力单元。

(3) 单元的刚度矩阵

设节点上无外载荷，则根据虚功原理，外力虚功的总和应等于单元内应力虚功的总和。设单元在节点力 $\boldsymbol{F}$ 的作用下处于平衡状态，则由虚功原理得

$$\boldsymbol{d}^{*T}\boldsymbol{F} = \int_V \boldsymbol{\varepsilon}^{*T}\sigma \mathrm{d}V$$

根据方程(5-2-20)和(5-2-22)式并注意到 $\boldsymbol{d}^*$ 和 $\boldsymbol{d}$ 与坐标无关，则可以得到

$$\boldsymbol{d}^{*T}\boldsymbol{F} = \boldsymbol{d}^{*T}\left(\int_V \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{DB}\mathrm{d}V\right)\mathbf{d} \qquad 或者$$

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{Kd} \tag{5-2-27}$$

其中

$$\boldsymbol{K} = \int_V \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{DB}\mathrm{d}V \tag{5-2-28}$$

称作单元的刚度矩阵，它是由节点位移分量表示节点力分量的转换矩阵，对于弹性平面问题有

$$\boldsymbol{K} = \iint_A \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{DB}t\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{5-2-29}$$

其中 t 为厚度。

一般情况下，求 $\boldsymbol{K}$ 需进行积分，但对于三角形单元 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 是常量矩阵，如果 t 也是常数则(5-2-29)式变成

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{DB}tA = \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{S}tA \tag{5-2-30}$$

通过矩阵连乘，对于平面问题可以得到一个 6×6 阶的矩阵

$$\boldsymbol{K}=\begin{bmatrix} k_{ii} & k_{ij} & k_{im} \\ k_{ji} & k_{jj} & k_{jm} \\ k_{mi} & k_{mj} & k_{mm} \end{bmatrix} \tag{5-2-31}$$

对于平面应力问题有

$$\boldsymbol{k}_{rs}=\frac{Et}{4(1-\mu^2)A}\begin{bmatrix} b_rb_s+\frac{1-\mu}{2}c_rc_s & \mu b_rc_s+\frac{1-\mu}{2}c_rb_s \\ \mu c_rb_s+\frac{1-\mu}{2}b_rc_s & c_rc_s+\frac{1-\mu}{2}b_rb_s \end{bmatrix} \quad (r,s=i,j,m) \tag{5-2-32}$$

对于平面应变问题有

$$\boldsymbol{k}_{rs}=\frac{E(1-\mu)t}{4(1+\mu)(1-2\mu)A}\begin{bmatrix} b_rb_s+\frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}c_rc_s & \frac{\mu}{1-\mu}b_rc_s+\frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}c_rb_s \\ \frac{1-\mu}{2}c_rb_s+\frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}c_rc_s & c_rc_s+\frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}b_rb_s \end{bmatrix}$$

$$(r,s=i,j,m) \tag{5-2-33}$$

三角形单元的刚度矩阵有如下性质：一是对称性，即单元刚度矩阵的元素间有 $kij=kji$；二是任何一行各元素之和为零；三是任何一列的第一、三、五或第二、四、六 3 个元素之和及全部 6 个元素之和均为零，这可以从六点节点力分量组成的是一个平衡力系来证明。

（4）外载荷向节点的转化

有限元法只建立节点的平衡方程，所以必须把外载荷转化到节点上去，转化的原则是“静力等效”，这样转化后的节点荷载和原载荷在任意虚位移上的功相等。

设在单元内或边界上任一点 $M(x,y)$ 作用一集中载荷向量 $\boldsymbol{P}$，如果用 $\boldsymbol{R}$ 表示转化成的节点载荷向量，则静力等效原则为

$$\boldsymbol{d}^{*T}\boldsymbol{R}=\boldsymbol{f}_m^{*T}\boldsymbol{p}=(\boldsymbol{N}_m\boldsymbol{d}^*)^T\boldsymbol{P}$$
$$=\boldsymbol{d}^{*T}\boldsymbol{N}_m^T\boldsymbol{P}$$

或

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{N}_m^T\boldsymbol{P} \tag{5-2-34}$$

如果在单元内作用有分布体积力 $W(x,y)$，那么

$$\boldsymbol{R}=\int_V \boldsymbol{N}^T\mathrm{w}\mathrm{d}\boldsymbol{V} \tag{5-2-35}$$

对于表面上的分布载荷有

$$\boldsymbol{R}=\int_A \boldsymbol{N}^T\boldsymbol{P}_s\mathrm{d}A \tag{5-2-36}$$

对于单元表面上沿曲线作用的分布载荷有

$$\boldsymbol{R}=\int_L \boldsymbol{N}^T\boldsymbol{P}_l\mathrm{d}l \tag{5-2-37}$$

下面分别讨论几种情况：

① 集中载荷　设在单元的 ij 边上作用有 X 方向的集中荷载，作用点到 i，j 点的距离分别为 l_i，l_j，那么由(5-2-34)式，可得

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{N}^T\boldsymbol{P}=\frac{\boldsymbol{P}}{l}[l_j\ 0\ l_i\ 0\ 0\ 0]^T \tag{5-2-38}$$

其中 $l=l_i+l_j$

② 分布载荷　设 ij 边上有三角形分布载荷(图 5-2-2)，q 为其最大值，则由(5-2-37)式可得

$$R=\frac{ql}{2}\begin{bmatrix}\frac{2}{3} & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}^T \tag{5-2-39}$$

③ 体积力　设单元内有均匀分布的体积力，单位面积上的体积力分量为

$$W=t[W_x\ W_y]^T$$

那么，由(5-2-35)式可得

$$R=\iint_A N^T W t\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\frac{1}{3}At[W_x\ W_y\ W_x\ W_y\ W_x\ W_y]^T \tag{5-2-40}$$

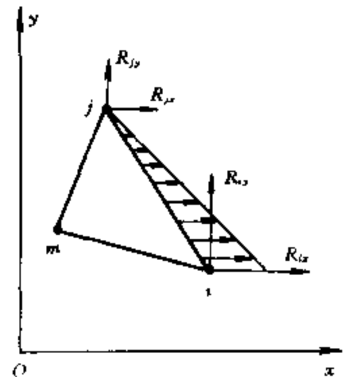


图 5-2-2　边界分布载荷引起的节点载荷

所以均匀分布的体积力的转化规律是把单元的体积力平均地分配到三个节点上。

由于三角形单元的位移函数是线性函数，所以外载荷向节点的转化符合刚体力学中力的合成和分解原则

三、轴对称问题单元分析

(1) 单元位移函数

和弹性平面问题一致，即(5-2-15)式

$$\left.\begin{aligned}u&=N_iu_i+N_ju_j+N_mu_m\\ v&=N_iv_i+N_jv_j+N_mv_m\end{aligned}\right\}$$

其中 u 和 v 分别代表 r 及 z 方向的位移

$$N_i=L_i=\frac{1}{2A}(a_i+b_ir+c_iz)\quad (i,j,m) \tag{5-2-41}$$

$$A=\frac{1}{2}\begin{vmatrix}1 & r_i & z_i\\ 1 & r_j & z_j\\ 1 & r_m & z_m\end{vmatrix} \tag{5-2-42}$$

$$\left.\begin{aligned}a_i&=r_jz_m-r_mz_j\\ b_i&=z_j-z_m\\ c_i&=r_m-r_j\end{aligned}\right\}\quad (i,j,m) \tag{5-2-43}$$

$$f=Nd$$

其中

$$f=[u\ v]^T$$

$$N=\begin{bmatrix}N_i & 0 & N_j & 0 & N_m & 0\\ 0 & N_i & 0 & N_j & 0 & N_m\end{bmatrix}$$

(2) 几何矩阵

由于轴对称问题的环向应变 ε_θ 不为零，而有 $\varepsilon_\theta=u/r$，所以几何矩阵与平面问题不同，为

$$B=[B_i\ B_j\ B_m] \tag{5-2-44}$$

其中

$$B_i = \frac{1}{2A}\begin{bmatrix} b_i & 0 \\ f_i & 0 \\ 0 & c_i \\ c_i & b_i \end{bmatrix} \qquad (i,j,m)$$

其中
$$f_i = \frac{a_i + b_i r + c_i z}{r} \qquad (i,j,m)$$

在单元内，f_i、f_j 和 f_m 是变量，为了简化问题，取形心坐标求其近似值

$$\bar{f}_i = \frac{a_i + b_i r_c + c_i z_c}{r_c} \qquad (i,j,m) \tag{5-2-45}$$

(3) 应力矩阵

轴对称问题的弹性矩阵为

$$\boldsymbol{D} = \frac{E(1-\mu)}{(1+\mu)(1-2\mu)}\begin{bmatrix} 1 & \frac{\mu}{1-\mu} & \frac{\mu}{1-\mu} & 0 \\ \frac{\mu}{1-\mu} & 1 & \frac{\mu}{1-\mu} & 0 \\ \frac{\mu}{1-\mu} & \frac{\mu}{1-\mu} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} \end{bmatrix} \tag{5-2-46}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{D\varepsilon} = \boldsymbol{DBd} = \boldsymbol{Sd}$$
$$\boldsymbol{S} = [S_i \quad S_j \quad S_m]$$

其中

$$\boldsymbol{S}_i = A_3\begin{bmatrix} b_i + A_1\bar{f}_i & A_1 c_i \\ A_1 b_i + \bar{f}_i & A_1 c_i \\ A_1(b_i + \bar{f}_i) & c_i \\ A_2 c_i & A_2 b_i \end{bmatrix} \quad (i,j,m) \tag{5-2-47}$$

其中
$$A_1 = \frac{\mu}{1-\mu}, \quad A_2 = \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)}, \quad A_3 = \frac{E}{4(1+\mu)A_2 A_1}$$

(4) 单元刚度矩阵

$$\boldsymbol{K} = \int_V \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{DB}dV = 2\pi r_c A\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{DB}$$
$$= \begin{bmatrix} k_{ii} & k_{ij} & k_{im} \\ k_{ji} & k_{jj} & k_{jm} \\ k_{mi} & k_{mj} & k_{mm} \end{bmatrix} \tag{5-2-48}$$

其中

$$\boldsymbol{k}_{rs} = \pi r_c A_3\begin{bmatrix} b_r b_s + \bar{f}_r\bar{f}_s + A_1(b_r\bar{f}_s + b_s\bar{f}_r) + A_2 c_r c_s & A_1 c_s(b_r + \bar{f}_r) + A_2 b_s c_r \\ A_1 c_r(b_s + \bar{f}_r) + A_2 b_r c_s & c_r c_s + A_2 b_r b_s \end{bmatrix}$$
$$(r,s = i,j,m) \tag{5-2-49}$$

$$\bar{f}_i = \bar{f}_j = \bar{f}_m = \frac{2A}{3r_c}$$

(5) 等效节点载荷

① 重力的等效节点载荷　设重力列向量为 $W=[0\ W_z]^T$，那么节点载荷

$$R=\int_V N^T W dV = 2\pi W_z \iint_A [0\ N_i\ 0\ N_j\ 0\ N_m]^T r dr dz$$

注意到 $N_i=L_i\ (i,j,m)$ 及 $r=N_ir_i+N_jr_j+N_mr_m$，可以得到

$$R=\frac{\pi A W_z}{6}[0\quad 2r_i+r_j+r_m\quad 0\quad r_i+2r_j+r_m\quad 0\quad r_i+r_j+2r_m]^T \tag{5-2-50}$$

或

$$R_{iz}=-\left(\frac{1}{4}+\frac{r_i}{12r_c}\right)\overline{W}\qquad (i,j,m) \tag{5-2-51}$$

其中 $\overline{W}$ 是单元重量。

② 旋转离心力的等效节点载荷　这里用 W 表示单位体积惯性力列向量，设其为

$$W=[W_r\quad W_z]^T=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\rho r\omega^2$$

设密度 ρ 和旋转角速度 ω 均为常数，那么

$$R=\int_V N^T W dV = 2\pi\rho\omega^2\iint_A [N_i\quad 0\quad N_j\quad 0\quad N_m]^T r^2 dr dz$$

$$=\frac{\pi\omega^2 A\rho}{15}\begin{bmatrix}9r_c^2+2r_i^2-r_jr_m\\0\\9r_c^2+2r_j^2-r_ir_m\\0\\9r_c^2+2r_m^2-r_ir_j\\0\end{bmatrix} \tag{5-2-52}$$

如果取 $r_i=r_j=r_m=r_c$ 则

$$R=\frac{2\pi r_c\rho A}{3}r_c\omega^2[1\quad 0\quad 1\quad 0\quad 1\quad 0]^T=\frac{\overline{W}}{3g}r_c\omega^2[1\quad 0\quad 1\quad 0\quad 1\quad 0]^T \tag{5-2-53}$$

③ 面力的等效节点载荷　设在 ij 边上有图 5-2-3 所示的线性分布载荷，我们有

$$q_r=L_iq_i+L_jq_j$$
$$q_z=0$$

写成列向量

$$P_s=\begin{bmatrix}L_iq_i+l_jq_j\\0\end{bmatrix}$$

$$R=\iint_A N^T P_s dA = 2\pi\int_0^l [N_i\ 0\ N_j\ 0\ N_m]^T (L_iq_i+l_jq_j)(L_ir_i+L_jr_j)ds$$

$$=\frac{\pi l}{6}\begin{bmatrix}(3r_i+r_j)q_i+(r_i+r_j)q_j\\0\\(r_i+r_j)q_i+(r_i+3r_j)q_j\\0\\0\\0\end{bmatrix} \tag{5-2-54}$$

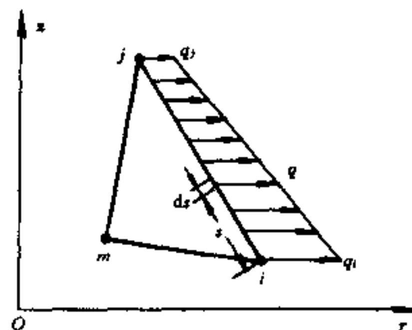


图 5-2-3　面力的等效节点载荷

5.2.3 总体分析

一、总体刚度矩阵的形成及结构静力平衡方程组的建立

在单元分析中为总体分析提供了单元刚度矩阵及节点载荷。在总体分析中，建立任一节点 i 的平衡方程时，必须考虑所有与该节点相连的单元的贡献，所以，每一单元刚度矩阵的每一项都必须按一定的规律对号累加，引入到总体刚度矩阵，也就是说，总体刚度矩阵的每一项，一般地讲都是若干单元刚度矩阵元素之和。总体刚度矩阵形成之后，仍有(5-2-27)式的形式，但此时 $\boldsymbol{F}$,$\boldsymbol{d}$ 及 $\boldsymbol{K}$ 都是对总体而言的。

$\boldsymbol{K}\,\boldsymbol{d}$ 为以节点位移表示的节点力的反作用力，它与该节点上的外载荷平衡。所以，要建立节点的平衡方程还必须计算节点上作用的外载荷。外载荷列向量 $\boldsymbol{R}$ 包括体积力列向量 $\boldsymbol{R}_B$、表面力列向量 $\boldsymbol{R}_S$和集中载荷列向量 $\boldsymbol{R}_c$，即

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}_B + \boldsymbol{R}_S + \boldsymbol{R}_c \tag{5-2-55}$$

节点外载荷的计算方法和由单元矩阵集合成总体矩阵的方法一样，即任一节点上的外载荷应包括所有与该节点相连的单元中及其边界上的外载荷转化来的载荷。

于是，结构的静力平衡方程组为

$$\boldsymbol{K}\,\boldsymbol{d} = \boldsymbol{R} \tag{5-2-56}$$

在(5-2-55)式中，右边各列向量可以表示成

$$\boldsymbol{R}_B = \sum_m \iiint_{V^{(m)}} \boldsymbol{H}^{(m)T}\boldsymbol{W}^{(m)}\mathrm{d}V^{(m)} \tag{5-2-57}$$

$$\boldsymbol{R}_s = \sum_m \iint_{s^{(m)}} \boldsymbol{H}^{s(m)T}\boldsymbol{P}^{s(m)}\mathrm{d}s^{(m)} \tag{5-2-58}$$

$$\boldsymbol{R}_c = \sum_m \boldsymbol{P}^c \tag{5-2-59}$$

上三式表示在与该节点相连的 m 个元素上求和。

二、动力平衡方程组的建立

方程(5-2-56)式为结构的静力平衡方程组，下面讨论动力方程组的建立。

当载荷随时间变化时应该考虑惯性力，根据达朗贝尔原理，可以简单地把惯性力看成体力的一部分，并把它从其他体力中分出，即

$$\boldsymbol{R}_B = \sum_m \iiint_{V^{(m)}} \boldsymbol{H}^{(m)T}(\boldsymbol{W}^{(m)} - \rho^{(m)}\boldsymbol{H}^{(m)}\ddot{\boldsymbol{d}})\mathrm{d}V^{(m)}$$

于是(5-2-56)式变成

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{d}} + \boldsymbol{K}\boldsymbol{d} = \boldsymbol{R} \tag{5-2-60}$$

其中质量矩阵

$$\boldsymbol{M} = \sum_m \iiint_{V^{(m)}} \rho^{(m)}\boldsymbol{H}^{(m)T}\boldsymbol{H}^{(m)}\mathrm{d}V^{(m)} \tag{5-2-61}$$

由于振动时机械能会损耗，所以需引入阻尼，如果认为阻尼力与速度成正比，并把阻尼力从其他体力中分出，即

$$\boldsymbol{R}_B = \sum_m \iiint_{V^{(m)}} \boldsymbol{H}^{(m)T}(\boldsymbol{W}^{(m)} - \rho^{(m)}\boldsymbol{H}^{(m)}\ddot{\boldsymbol{d}} - \xi^{(m)}\boldsymbol{H}^{(m)}\dot{\boldsymbol{d}})\mathrm{d}V^{(m)}$$

令

$$C = \sum_m \iiint_{V(m)} \xi^{(m)} H^{(m)T} H^{(m)} dV^{(m)} \quad (\text{阻尼矩阵}) \tag{5-2-63}$$

则(5-2-60)式变成

$$M\ddot{d} + C\dot{d} + Kd = R \tag{5-2-64}$$

这就是结构的动力平衡方程组，其中的惯性力、阻尼力、弹性力及外载荷均随时间变化。

三、动力平衡方程组的求解

结构的静力平衡方程组(5-2-56)式的求解我们不进行讨论，这里只简单地讨论一下动力平衡方程组(5-2-64)式的求解。

(5-2-64)式是二阶线性微分方程组，由于系数矩阵的阶数及未知数的个数可能很大，求解时必须利用矩阵 M，C 和 K 的特殊性质。

方程组(5-2-64)式的解法主要有直接积分法及振型叠加法两大类，直接积分法中又有中心差分法。Houbolt 法、Wilson 法和 Newmark 法等。为了同以后要讲到的动力有限元程序 DEFEL 进行类比，这里只讨论直接积分法中的中心差分法。

下面将主要讨论忽略物理阻尼时方程组(5-2-64)式的解，也就是方程组(5-2-60)式的解，可以证明，当质量矩阵是对角矩阵时，用中心差分法求解，可以不必形成总体刚度矩阵和总体质量矩阵，求解可以在单元一级上进行，这样计算所需的高速存储量较小。如果有阻尼力，但阻尼矩阵也是对角矩阵时，仍可在单元一级上求解。

后面要讲到的动力有限元程序 DEFEL，将单元的质量分别集中到三个节点上，它的质量矩阵是对角矩阵，该程序也是在单元一级上求解的，解法同上述的中心差分直接积分法类似。

方程组(5-2-60)或(5-2-64)式是常系数常微分方程组，如果用差商代替微分且采用中心差分格式，那么

$$\ddot{d} = \frac{1}{\Delta t^2}(d_{t-\Delta t} - 2d_t + d_{t+\Delta t}) \tag{5-2-65}$$

$$\dot{d} = \frac{1}{2\Delta t}(-d_{t-\Delta t} + d_{t+\Delta t}) \tag{5-2-66}$$

此两式的误差是属于$(\Delta t)^2$ 阶的，将此两式代入(5-2-64)式得

$$\left(\frac{1}{\Delta t^2}M + \frac{1}{2\Delta t}C\right)d_{t+\Delta t} = R - \left(K - \frac{2}{\Delta t^2}M\right)d_t - \left(\frac{1}{\Delta t^2}M - \frac{1}{2\Delta t}C\right)d_{t-\Delta t} \tag{5-2-67}$$

在计算 $d_{t+\Delta t}$时，需知道 d_t 和 $d_{t-\Delta t}$。在初始时刻，由于 d_0，$\dot{d}_0$ 和 $\ddot{d}_0$ 均为已知，那么由方程(5-2-65)和(5-2-66)式可以求得

$$d_{-\Delta t}^{(i)} = d_0^{(i)} - \Delta t \dot{d}_0^{(i)} + \frac{\Delta t^2}{2}\ddot{d}_0^{(i)} \tag{5-2-68}$$

上角标 i 表示节点号。如果 C 是零矩阵则(5-2-67)变成

$$\left(\frac{1}{\Delta t^2}M\right)d_{t+\Delta t} = \hat{R} = R - \left(K - \frac{2}{\Delta t^2}M\right)d_t - \left(\frac{1}{\Delta t^2}M\right)d_{t-\Delta t} \tag{5-2-69}$$

可见，如果 M 是对角矩阵就无需进行矩阵的三角分解来求解，因而也就没有必要形成总体刚度矩阵和总体质量矩阵。

由于总体矩阵为

$$K = \sum_i K_i \qquad M = \sum_i M_i$$

其中 K_i 和 $\check{M}_i$ 是第 i 单元的刚度矩阵和质量矩阵。可见在求(5-2-69)式右端各项时可以在单元一级上将每个单元对有效载荷向量的贡献相加而得到，即利用下式来计算 $\hat{R}$

$$\hat{R} = R - \sum_i K_i d_t - \sum_i \frac{1}{\Delta t^2} M_i (d_{t-\Delta t} - 2d_t)$$

方程(5-2-69)式变成

$$\sum_i \frac{1}{\Delta t^2} M_i d_{t+\Delta t} = R - \sum_i K_i d_t - \sum_i \frac{1}{\Delta t^2} M_i (d_{t-\Delta t} - 2d_t) \qquad (5\text{-}2\text{-}70)$$

上式还可以写成

$$\sum_i m_i \ddot{d}_t = R - \sum_j K_j d_t \qquad (5\text{-}2\text{-}71)$$

由于对任一节点的质量、弹性力、外载荷引起的集中力有贡献的只能是与该节点相连的单元，所以(5-2-70)、(5-2-71)式可以基本上在单元一级上求解。

对于内部节点，如不考虑重力等引起的节点集中载荷，则(5-2-70)式变成

$$\sum_i \frac{1}{\Delta t^2} M_i d_{t+\Delta t} = -\sum_i K_i d_t - \sum_i \frac{1}{\Delta t^2} M_i (d_{t-\Delta t} - 2d_t) \qquad (5\text{-}2\text{-}72)$$

(5-2-71)式则变成

$$\sum_i M_i \ddot{d}_t = -\sum_i K_i d_t \qquad (5\text{-}2\text{-}73)$$

DEFEL 程序所用的节点运动方程的形式与上式相似，但因为有塑性变形，所以节点力不是通过单元刚度矩阵而是根据静力平衡来计算的(以后详细讨论)。

四、中心差分直接积分法解的稳定性

直接积分法的计算费用和时间步长成反比，从这个意义上讲，时间步长应尽量取大，但太大又会降低计算精度，特别是对中心差分这种条件稳定的差分格式还会导致解的不稳定，所以时间步长的选取必须进行全面考虑。

对具体的积分方法只需考虑一种典型的积分[1]

$$\ddot{x} + 2\xi\omega\dot{x} + \omega^2 x = R \qquad (5\text{-}2\text{-}74)$$

这是一个含有自由振动周期 $T=2\pi/\omega$、阻尼比 ξ 及外载荷 R 的单自由度平衡控制方程。研究直接积分法解的性质就在于估计方程(5-2-74)式作为 $\Delta t/T$、ξ 和 R 的函数的解的积分误差。

设各时刻解之间的传递关系为

$$\hat{x}_{t+\Delta t} = A\hat{x}_t + LR_{t+v} \qquad (5\text{-}2\text{-}75)$$

其中 $\hat{x}$ 是存放解的各量的列向量，而 R_{t+v}是 $t+v$ 时刻的载荷，A 和 L 分别为积分逼近算子和载荷算子。

于是，任一时刻 $t+n\Delta t$ 的解为

$$\hat{x}_{t+n\Delta t} = A^n\hat{x}_t + A^{n-1}LR_{t+v} + \cdots\cdots + ALR_{t+(n-2)\Delta t+v} + LR_{t+(n-1)\Delta t+v} \qquad (5\text{-}2\text{-}76)$$

对中心差分格式

$$\ddot{x}_0 = \frac{1}{\Delta t^2}(x_{t-\Delta t} - 2x_t + x_{t+\Delta t})$$

$$\dot{x}_t = \frac{1}{2\Delta t}(-x_{t-\Delta t} + x_{t+\Delta t})$$

将此两式代入(5-2-74)式得

$$x_{t+\Delta t} = \frac{2-\omega^2\Delta t^2}{1+\xi\omega\Delta t}x_t - \frac{1-\xi\omega\Delta t}{1+\xi\omega\Delta t}x_{t-\Delta t} + \frac{\Delta t^2}{1+\xi\omega\Delta t}R_t \qquad (5\text{-}2\text{-}77)$$

将此式写成(5-2-75)式的形式

$$\begin{bmatrix} x_{t+\Delta t} \\ x_t \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} x_t \\ x_{t-\Delta t} \end{bmatrix} + LR_t \tag{5-2-78}$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} \dfrac{2-\omega^2\Delta t^2}{1+\xi\omega\Delta t} & -\dfrac{1-\xi\omega\Delta t}{1+\xi\omega\Delta t} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{5-2-79}$$

$$L = \begin{bmatrix} \dfrac{\Delta t^2}{1+\xi\omega\Delta t} \\ 0 \end{bmatrix}$$

确定一种积分方法的稳定性，要通过在任意初始条件下对数值解的性质进行检验。我们考虑无载荷即 $R=0$ 时的积分，此时(5-2-76)式变成

$$\boldsymbol{x}_{t+n\Delta t} = \boldsymbol{A}^n \boldsymbol{x}_t \tag{5-2-80}$$

此式可以用来研究积分方法的稳定性，如果对任意的 Δt，上式都不会无限制地增加，则是无条件稳定的；如果只有当 $\Delta t/T$（注：T 为振动周期）小于某一称作稳定极限的确定值时才不会无限增加，则称为条件稳定。

下面对 A 做谱分解来进行分析

$$\boldsymbol{A}^n = \boldsymbol{P}\boldsymbol{J}^n\boldsymbol{P}^{-1} \tag{5-2-81}$$

其中 $\boldsymbol{P}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量矩阵，$\boldsymbol{J}$ 为对角矩阵，其元素为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，只有当 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径 $\rho=\max|\lambda_i|\leqslant 1$ 时，$\boldsymbol{J}^n$ 才是有界的，并且 ρ 越小收敛越快。

下面求 $\xi=0$ 时，$\boldsymbol{A}$ 的谱半径，此时(5-2-79)式变成

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2-\omega^2\Delta t^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

它的特征值为

$$\lambda_1 = \frac{2-\omega^2\Delta t^2}{2} + \sqrt{\frac{(2-\omega^2\Delta t^2)^2}{4} - 1}$$

$$\lambda_2 = \frac{2-\omega^2\Delta t^2}{2} - \sqrt{\frac{(2-\omega^2\Delta t^2)^2}{4} - 1}$$

从上两式可以看出，ρ 是 $\Delta t/T$ 的函数($T=2\pi/\omega$)，当 $\Delta t/T<1/\pi$ 时，ρ 小于 1，所以临界稳定时间步长 $\Delta t_{cp}=T_n/\pi$，其中 T_n 为有限元集合体的最小周期。

如果采用大于 Δt_{cp} 的时间步长，则计算是不稳定的，甚至使计算结果没有意义。

动力有限元程序 DEFEL 所采用的差分格式也是条件稳定的，其时间步长的计算留待以后讨论。

§5.3 动力有限元方法[5~16]

本节将根据动力有限元程序 DEFEL 讲述动力有限元计算方法。DEFEL 是一个二维流体弹塑性程序，采用三角形单元，适用于平面及轴对称问题。

5.3.1 动力有限元的分析步骤

由于动力有限元是将单元的质量分别放在三个节点上，所以其质量矩阵为对角矩阵，它的积分过程是在单元一级上进行的，这一点同对角质量矩阵结构有限元方程组采用中心差分格式直接积分的方法类似。

一、区域离散化及初始节点和单元参数计算

同结构有限元一样，动力有限元也是首先将求解区域离散化成单元，并输入和计算初始单元和节点参数、节点的初始速度及单元的初始应力。初始密度一般为输入量，单元的初始体积根据其节点的坐标进行计算，节点的质量由和它相连的各单元对它的质量贡献累加得到。对于平面问题，单元的质量分成三等份，分别送给该单元的三个节点；对于轴对称问题，单元的质量则按(5-2-51)式分成不等的三份，并分别送给它对应的三个节点。

同结构有限元一样，动力有限元网格的划分是十分灵活的，可以等间距划分，也可以根据需要划分成各种各样的不等间距网格。

二、节点位移的计算及交界面处理

节点位移是根据节点集中力、节点质量按牛顿第二定律计算的。例如在 $t+\Delta t$ 时刻节点 i 在 x 方向及 y 方向的位移可以分别写成

$$\left.\begin{aligned} u_{t+\Delta t}^{(i)} &= u_t^{(i)} + (\dot{u}_t^{(i)} + \frac{F_x^{(i)}\Delta t}{2m^{(i)}})\Delta t \\ v_{t+\Delta t}^{(i)} &= v_t^{(i)} + (\dot{v}_t^{(i)} + \frac{F_y^{(i)}\Delta t}{2m^{(i)}})\Delta t \end{aligned}\right\} \tag{5-3-1}$$

其中 $F_x^{(i)}$ 和 $F_y^{(i)}$ 分别为节点力在 x 及 y 方向的分量，$m^{(i)}$ 为节点 i 的质量，$\dot{u}_t$ 和 $\dot{v}_t$ 分别表示 t 时刻节点 i 在 x 及 y 方向的速度分量。

初始时间步长 Δt 是输入的，以后将由程序自动计算。

节点位移计算完之后，立刻对不同材料交界面的节点位置进行检查，如果一种材料的界面节点进入另一种材料内部，则按一定的方法进行处理并把它拉回到交界面，详细处理方法将在交界面部分阐述。

三、单元应力偏量、压力、内能的计算

DEFEL 方法也采用线性形函数，它的单元自然也是等应变和等应力单元。在节点速度和位置确定之后，就可以计算出单元应变偏量和应变率偏量，根据广义虎克定律可以进一步计算出在弹性假设下该单元的应力偏量。与结构有限元不同的是，必须检验单元的状态是不是确实在弹性范围内，如果是，那么所求的应力偏量即为该单元的值；如果单元的材料是处于塑性状态，则把各应力偏量按比例缩小拉回到屈服面，可以证明这种处理方法符合 Von Mises 屈服准则和 Prandtl—Reuss 塑性流动规律。

由于压力和内能的互相影响，它们的计算是同时进行的，具体方法留待状态方程一节讨论。

四、时间步长的计算

在单元形状(节点位置)及状态确定之后，就可以计算出每个单元所确定的临界时间步长，该临界值正比于单元的最小高(即最长边上的高)，反比于声速。选用步长取为各单元所决定的临界时间步长的最小值再乘上一个稳定系数。

时间步长的选取原则是，任何一个单元中的扰动在下一时间步长内的传播距离必须小于该单元的最小高。这是差分格式稳定性的要求。

五、节点集中力的计算

节点集中力是根据静力平衡原则由和该节点相连的所有单元的应力进行计算，具体算法将在有关部分详述。

节点力求出之后，就可以计算下一时间步长节点的位移，这就返回到第二步的计算，并进入下一循环。

此外，在计算过程中，还随时或定期检查单元畸变情况，必要时就采取再分区或侵蚀法进行处理。

从以上分析步骤来看，动力有限元同结构有限元有不少相似之处。例如动力有限元也将计算区域离散化成单元，单元之间由节点联接，也采用形函数，并在节点位移已知的情况下根据形函数计算单元的应变和应力，所以这种算法被列入有限元法不是没有道理的。但动力有限元同结构有限元有本质的差别，结构有限元是根据最小势能原理求节点位移的，它必须建立单元刚度矩阵，有的算 法还要建立总体刚度矩阵；而动力有限元由于可能有塑性变形，因而不可能根据最小势能原理求节点位移，而是根据单元的应力由静力平衡计算节点集中力，并进一步计算节点位移，所以该算法不是基于变分原理的，也不建立任何刚度矩阵。从节点力的计算上看，动力有限元的算法与有限差分有相似之处，都是分析力的平衡。这就是为什么说动力有限元是有限元和有限差分之间的一种算法。

5.3.2 材料本构关系及破坏问题

动力有限元程序多是用来计算高应变率和大塑性变形问题，在这种情况下材料的本构关系尚不十分清楚。同很多其他程序一样，DEFEL 采用了静态下的弹塑性关系，只是根据压力、温度、有效塑性应变及应变率对屈服强度进行调整，并且在计算过程中一旦发现应力状态跑到屈服面的外面，就按比例缩小各应力偏量，将应力状态拉回到屈服面上，这种处理方法自 60 年代初 W・L・Wilkins 使用以来[8]，一直被很多程序所采用，我们将证明这种处理方法的合理性。

本节在分析讨论时只给出轴对称问题的公式，平面问题从略。

一、弹性区

在弹性区，虎克定律被用来描述应力偏量和应变偏量的关系

$$e_{ij} = \frac{1}{2G}S_{ij} \qquad (i,j = r,z,\theta) \tag{5-3-2}$$

其中 e_{ij} 为应变偏量张量，S_{ij} 为应力偏量张量，G 为剪切模量。

已知 t 时刻的应力偏量，程序按下面的公式计算 $t+\Delta t$ 时刻的应力偏量

$$S_{rr}^{t+\Delta t} = S_{rr}^{t} + 2G\dot{e}_{rr}\Delta t - 2S_{rz}^{t}\omega_{rz}\Delta t \tag{5-3-3}$$

$$S_{zz}^{t+\Delta t} = S_{zz}^{t} + 2G\dot{e}_{zz}\Delta t + 2S_{rz}^{t}\omega_{rz}\Delta t \tag{5-3-4}$$

$$S_{\theta\theta}^{t+\Delta t} = S_{\theta\theta}^{t} + 2G\dot{e}_{\theta\theta}\Delta t \tag{5-3-5}$$

$$S_{rz}^{t+\Delta t} = S_{rz}^{t} + 2G\dot{e}_{rz}\Delta t + (S_{rr}^{t} - S_{zz}^{t})\omega_{rz}\Delta t \tag{5-3-6}$$

$$S_{r\theta}^{t+\Delta t} = S_{r\theta}^{t} + 2G\dot{e}_{r\theta}\Delta t \tag{5-3-7}$$

$$S_{z\theta}^{t+\Delta t} = S_{z\theta}^{t} + 2G\dot{e}_{z\theta}\Delta t \tag{5-3-8}$$

其中(5-3-3)、(5-3-4)及(5-3-6)式中右边最后一项是由于在$r-z$平面内的旋转引起的，旋转引起了面的方向的改变，因而t时刻$r-z$平面内的切应力和垂直应力偏量，分别对$t+\Delta t$时刻该平面内的垂直应力和切应力偏量有贡献。

应变率取决于速度场，由下面的公式计算

$$\dot{\varepsilon}_{rr}=\frac{\partial\dot{u}}{\partial r} \tag{5-3-9}$$

$$\dot{\varepsilon}_{zz}=\frac{\partial\dot{v}}{\partial z} \tag{5-3-10}$$

$$\dot{\varepsilon}_{\theta}=\frac{\dot{u}}{r} \tag{5-3-11}$$

$$\dot{\varepsilon}_{rz}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\dot{u}}{\partial z}+\frac{\partial\dot{v}}{\partial r}\right) \tag{5-3-12}$$

$$\dot{\varepsilon}_{r\theta}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\dot{W}}{\partial r}-\frac{\dot{W}}{r}\right) \tag{5-3-13}$$

$$\dot{\varepsilon}_{z\theta}=\frac{1}{2}\frac{\partial\dot{W}}{\partial z} \tag{5-3-14}$$

旋转角速度

$$\omega_{rz}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\dot{v}}{\partial r}-\frac{\partial\dot{u}}{\partial z}\right) \tag{5-3-15}$$

其中u、v和W分别为r、z和θ方向的位移。

平均法向应变率为

$$\dot{\varepsilon}_m=\frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}=\frac{1}{3}(\dot{\varepsilon}_{rr}+\dot{\varepsilon}_{zz}+\dot{\varepsilon}_{\theta\theta})$$

其中V为体积。

于是应变率偏量可以写成

$$\dot{e}_{ij}=\dot{\varepsilon}_{ij}-\delta_{ij}\dot{\varepsilon}_m \quad (i,j=r,z,\theta) \tag{5-3-16}$$

二、屈服准则

DEFEL 采用了 Von Mises 屈服准则或者叫畸变能屈服准则。当弹性畸变能达到一定值时，材料就屈服，开始产生塑性变形。

弹性应变能的表达式为

$$U=\frac{1}{2}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}$$

这里i,j两次出现表示求和。代入$\sigma_{ij}=-P\delta_{ij}+S_{ij}$得

$$\begin{aligned}U&=-\frac{1}{2}P\delta_{ij}\varepsilon_{ij}+\frac{1}{2}S_{ij}\varepsilon_{ij}\\&=-\frac{1}{2}P\frac{\Delta V}{V}+\frac{1}{2}S_{ij}(e_{ij}+\delta_{ij}\varepsilon_m)\\&=-\frac{1}{2}P\frac{\Delta V}{V}+\frac{1}{4G}S_{ij}S_{ij}\\&=-\frac{1}{2}P\frac{\Delta V}{V}+Ge_{ij}e_{ij}\end{aligned}$$

上式中，右边第一项为弹性体积变形能，第二项即为弹性畸变能，它可以改写成

$$U_d = \frac{1}{4G}S_{ij}S_{ij} = \frac{1}{2G}J_2 = \frac{1}{6G}\sigma_e^2$$

其中 $J_2=\frac{1}{2}S_{ij}S_{ij}$ 为应力偏量第二不变量。不难看出，J_2 和弹性畸变能成正比，所以用 J_2 作判断准则实际上也是畸变能准则。

$$\sigma_e = \sqrt{\frac{3}{2}S_{ij}S_{ij}} = \sqrt{\frac{3}{2}(S_{rr}^2 + S_{zz}^2 + S_{\theta\theta}^2) + 3(S_{rz}^2 + S_{z\theta}^2 + S_{\theta r}^2)}$$

$$= \sqrt{6GU_d} \tag{5-3-17}$$

是所谓有效应力，它和弹性畸变能的平方根成正比，所以用 σ_e 作判断准则也是畸变能准则。在简单拉伸时，σ_e 等于轴向拉应力，当 σ_e 等于简单拉伸下的屈服应力 σ_0 时材料开始屈服。

在 DEFEL 程序中，不断地计算各单元的有效应力 σ_e，并同该单元的屈服强度计算值进行比较，判断材料是否处于屈服状态。

三、塑性流动规律

DEFEL 程序采用 Prandtl－Reuss 塑性流动律，这个规律是假设塑性应变增量与相应的应力偏量成正比，即

$$\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{S_{ij}} = d\lambda \quad (i,j = r,z,\theta) \tag{5-3-18}$$

其中 $d\lambda$ 为常数。

为了方便起见，取 $d\varepsilon_p$ 为有效塑性应变增量，其定义为

$$d\varepsilon_p = \sqrt{\frac{2}{3}d\varepsilon_{ij}^p d\varepsilon_{ij}^p} \tag{5-3-19}$$

塑性应变能增量为

$$\begin{aligned} dW_p &= \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^p = (-P\delta_{ij} + S_{ij})d\varepsilon_{ij}^p \\ &= -P\delta_{ij}d\varepsilon_{ij}^p + S_{ij}d\varepsilon_{ij}^p \\ &= S_{ij}d\varepsilon_{ij}^p \end{aligned}$$

将(5-3-18)式代入上式得

$$\begin{aligned} dW_p &= d\lambda S_{ij}S_{ij} \\ &= \frac{1}{d\lambda}d\varepsilon_{ij}^p d\varepsilon_{ij}^p \end{aligned} \tag{5-3-20}$$

将(5-3-17)和(5-3-19)式代入上式得

$$d\lambda = \frac{3d\varepsilon_p}{2\sigma_e} \tag{5-3-21}$$

将此式代入(5-3-20)式得

$$dW_p = \sigma_e d\varepsilon_p \tag{5-3-22}$$

将(5-3-21)式代入(5-3-18)式就得到塑性应变张量增量和应力偏量张量之间的关系

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{3}{2}\frac{d\varepsilon_p}{\sigma_e}S_{ij} \tag{5-3-23}$$

DEFEL 程序对方程(5-3-19)式积分计算每个单元的有效塑性应变 ε_p，并用来计算该单元材料的屈服强度和判断是否会产生破坏。方程(5-3-22)式则用来计算塑性变形能，并转化为该单元材料的内能。

四、动态屈服强度

很多材料在动态下的性能与静态下极不相同。动态性能要受到塑性应变、应变率、压力和温度等的影响，但目前材料的动态性能实验数据还很不足，这给数值模拟研究带来了困难。

DEFEL 程序采用简单模型计算材料的动态屈服强度。对塑性应变的影响采用下面的线性关系

$$\left.\begin{aligned} Y_s &= Y_0 + \frac{Y_m - Y_0}{\varepsilon_p^m}\varepsilon_p \qquad (0 < \varepsilon_p < \varepsilon_p^m) \\ Y_s &= Y_m \qquad\qquad (\varepsilon_p \geqslant \varepsilon_p^m) \end{aligned}\right\} \tag{5-3-24}$$

当有效塑性应变从 0 增加到 ε_p^m 时，屈服强度线性地从 Y_0 增加到 Y_m，当 ε_p 继续增加时，屈服强度不再增加。

应变率，压力和温度对屈服强度的影响是按下面公式计算

$$Y = Y_s[1 + c_1\ln(\dot{\varepsilon}_p)](1 + c_2\overline{P} + c_3\overline{P}^2)(c_4 + c_5T) \tag{5-3-25}$$

其中 Y_s 是按(5-3-24)式计算的，c_1，……，c_5 为材料常数，$\overline{P}=P+Q$ 为压力和人工粘性之和，$\dot{\varepsilon}_p$ 为有效塑性应变率，其定义可参看方程(5-3-19)式，T 为绝对温度。

五、动态破坏问题

动态破坏比动态屈服更为复杂，研究结果和数据也更少。原则上讲动态破坏也同塑性应变、应变率、压力、温度等有关，但由于缺少可靠地建立在实验基础上的动态破坏准则，DEFEL 只采用体应变(或相对密度)及有效塑性应变作为材料破坏的判别准则。

当某元素的体应变 $\varepsilon_V=V/V_0-1$(其中 V 和 V_0 分别为该单元的体积和初始体积)增加到某一数值，或其有效塑性应变 ε_p 增加到某一值时，就认为该单元材料因破坏而永久失去强度，和流体一样它只能有静水压，而应力偏量始终为零。

近两年来，DEFEL 的作者还使用该程序计算了弹丸撞击金属靶板时背面的层裂现象[12]。使用的断裂准则是最大拉应力准则，当一个单元的最大拉应力达到或超过某一规定值时，就在该拉应力的垂直方向产生裂纹。虽然模型显得过于简单，但取得的结果与实验较一致(参看图 5-4-7)。

5.3.3 材料的状态方程

本节将讨论两个问题：一是 DEFEL 采用的 Mie－Grüneisen 状态方程；二是激波绝热关系中系数的确定问题。

一、Mie-Grüneisen 状态方程

Mie-Grüneisen 状态方程经常写成下面的形式[9]

$$P - P_H(V_H) = \frac{\gamma(V)}{V}[E - E_H(V_H)] \tag{5-3-26}$$

这种写法是以 Rankine－Hugoniot(激波绝热线)为参照线，其中 P_H，V_H 和 E_H 是激波绝热线上的量。

P_H 和 V_H 的关系可以由实验得到，而且可以写成下面的形式

$$\left.\begin{aligned} P_H &= C\mu + D\mu^2 + S\mu^3 \qquad (\mu \geqslant 0) \\ P_H &= C\mu \qquad\qquad (\mu < 0) \end{aligned}\right\} \tag{5-3-27}$$

其中 C，D，S 是常数，$\mu=\dfrac{\rho_H}{\rho_0}-1$，$\rho_H$ 和 ρ_0 为密度和初始密度。

激波间断的质量守恒、动量守恒及能量守恒方程为

$$\rho_o U_s = \rho_H (U_s - U_p) \tag{5-3-28}$$

$$P_H - P_o = \rho_o U_s U_p \tag{5-3-29}$$

$$P_H U_p = \frac{1}{2}\rho_o U_s U_p^2 + \rho_o U_s (E_H - E_o) \tag{5-3-30}$$

其中 U_s 和 U_p 分别为激波和质点速度(坐标系选择得使波前质点速度为零),下标 H 表示波阵面后的量,下标 0 表示初始量。

由方程(5-3-28)至(5-3-30)式可以导出下面的 Rankine—Hugoniot 方程

$$E_H - E_o = \frac{1}{2}(P_H + P_o)(V_o - V_H) \tag{5-3-31}$$

这是激波绝热线上内能同压力、比容的关系,将此式代入(5-3-26)式得

$$P = P_H \frac{\gamma(V)}{2}\rho(P_H - P_o)\frac{\rho_H - \rho_o}{\rho_H \rho_o} + \gamma(V)\rho(E - E_o)$$

忽略 P_o(通常 $P_H \gg P_o$),取 $\rho_H = \rho$ 及 $E_o = 0$,则上式变成

$$P = P_H\left[1 - \frac{\gamma(V)\mu}{2}\right] + \gamma(V)\rho E$$

或者

$$P = (C\mu + D\mu^2 - S\mu^3)\left[1 - \frac{\gamma(V)\mu}{2}\right]\gamma(V)\rho E \tag{5-3-32}$$

至于 Grüneisen 系数 γ 同比容的关系,程序中选用

$$\gamma(v) = \gamma_o \frac{v}{V_o} = \gamma_o \frac{\rho_o}{\rho} \tag{5-3-33}$$

在元素膨胀时($\rho < \rho_o$),$\gamma(V)$ 的最大值取为 $2\gamma_o$,将(5-3-33)式代入(5-3-32)式得

$$P = (C\mu + D\mu^2 + S\mu^3)\left(1 - \frac{\gamma_o \rho_o \mu}{2\rho}\right) + \gamma_o \rho_o E \tag{5-3-34}$$

上式即为 DEFEL 采用的状态方程,其中 $\gamma_o = \gamma(V_o)$ 可以由上式确定

$$\gamma_o = -\frac{V_o \alpha_o}{C_{V_o} k_o}$$

其中 C_{V_o} 为室温下的定容比热,α_o 为室温下的热膨胀系数,k_o 为室温下的压缩系数。

方程(5-3-34)式中右边第一项

$$P_V = (C\mu + D\mu^2 + S\mu^3)\left(1 - \frac{\gamma_o \rho_o \mu}{2\rho}\right) \tag{5-3-35}$$

只和密度有关,第二项则和比内能有关。

值得指出的是,如果 γ 取成常数 γ_o,元素的压力经常会出现异常。下面就来分析一下 P_V 随 μ 的变化。

将(5-3-35)式两边对 μ 求导得

$$\frac{dP_V}{d\mu} = (C + 2D\mu + 3S\mu^2)\left(1 - \frac{\gamma_o \rho_o \mu}{2\rho}\right) + (C\mu + D\mu^2 + S\mu^3)\left(\frac{1}{2\rho^2}\gamma_o \mu \rho_o^{\,2} - \frac{1}{2\rho}\gamma_o \rho_o\right)$$

如果取 $\gamma = \gamma_o$,则从(5-3-32)式很容易得到

$$p_v = (C\mu + D\mu^2 + S\mu^3)\left(1 - \frac{\gamma_o \mu}{2}\right) \qquad \text{以及}$$

$$\frac{dP_v}{d\mu}=(C+2D\mu+3S\mu^2)(1-\frac{\gamma_o\mu}{2})+(C\mu+D\mu^2+S\mu^3)(-\frac{\gamma_o}{2})$$

对于软钢，取 $C=1.01381\times10^6\text{kg/cm}^2$，$D=-0.24748\times10^6\text{kg/cm}^2$，$S=1.037439\times10^7\text{kg/cm}^2$，$\gamma_o=1.17$，$\rho_o=7.8\text{g/cm}^3$，那么对于 $\gamma=\gamma_o$ 的情况，当 $\mu=1.2713$ 时，P_V 有极大值，μ 继续增加时，P_v 反而下降。但如果取 $\gamma=\gamma_o\frac{\rho_0}{\rho}$，则随着 μ 的增加，P_V 一直是上升的，后一种趋势比前一种合理。

当取 $\gamma=\gamma_o$ 并用 DEFEL 计算高速碰撞问题时，发现有的元素被过度压缩，其压力反而不高，那么导致的结果是该元素被进一步压缩，这在物理概念上明显是不合理的，改用(5-3-33)式后情况有所好转。

此外，还将方程(5-3-33)式与采用 Slater 及 D—M 公式对铝和铜的 $\gamma(V)$ 计算结果[11]进行了对比。对于铝，方程(5-3-33)式同 Slater 公式的计算结果比较一致，当 V/V_o 从 1 下降到 0.82 时，按 Slater 公式 γ 从 2.026 下降到 1.568，按(5-3-33)式则下降到 1.661，和 1.568 相差约 6%。对于铜，方程(5-3-33)式则和 D—M 公式的结果很接近，当 V/V_o 从 1 下降到 0.88 时，按 D—M 公式 γ 从 1.994 下降到 1.783，按方程(5-3-33)式则应下降到 1.755，只相差约 1.5%。

值得指出的是，Slater 公式和 D—M 公式计算的结果相差很大，可见想要准确地确定材料的 $\gamma-V$ 关系是很困难的。

二、激波绝热关系中系数的确定

方程(5-3-27)式中的系数需由实验确定。由方程(5-3-28)和(5-3-29)式可知，只要同时测定两个未知数(例如 U_s 和 U_p)，就可以得到 $P-\mu$ 平面上的一点，用适当的方法对实验点进行数据处理，就可以得到系数 C、D、和 S。

此外，对于很多材料，激波速度和质点速度之间存在着线性关系

$$U_s=c_o+\lambda U_p$$

将此式代入(5-3-28)和(5-3-29)或消去 U_s 和 U_p，并注意到

$$\mu=\frac{\rho}{\rho_o}-1$$

就得到

$$P_H=\frac{\rho_o c_o^2\mu(\mu+1)}{[1+\mu(1-\lambda)]^2} \tag{5-3-37}$$

这就是 $P-\mu$ 平面上的激波绝热线。此方程还可以改写成(5-3-27)式的形式，事实上只要分别把方程(5-3-27)和(5-3-37)式对 μ 微分，求出 $\left(\frac{dP_H}{d\mu}\right)_{\mu=0}$，$\left(\frac{d^2P_H}{d\mu^2}\right)_{\mu=0}$ 及 $\left(\frac{d^3P_H}{d\mu^3}\right)_{\mu=0}$ 并令其对应相等，就可以得到

$$\left.\begin{aligned}C&=\rho_o c_o^2\\ D&=C[1+2(\lambda-1)]\\ S&=C[2(\lambda-1)+3(\lambda-1)^2]\end{aligned}\right\} \tag{5-3-38}$$

下面看看，c_o 和材料的体波声速(Bulk sound speed)的关系。

当压力不高时

$$dP=-k\frac{dV}{V}=k\frac{d\rho}{\rho}$$

或 $$P = k\ln\frac{\rho}{\rho_o} \tag{5-3-39}$$

其中 k 为体积弹性模量。

体波声速为

$$c_b = \sqrt{k/\rho_o}$$

于是 $$k = \rho_o c_b^2$$

将方程(5-3-39)两边对 μ 求导

$$\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}\mu}\right)_{\mu=o} = \left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}\rho}\right)_{\rho=\rho_0}\left(\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}\mu}\right)_{\mu=0} = k = \rho_o c_b^2 \tag{5-3-40}$$

将(5-3-40)式与(5-3-27)式相比较可以看出，如果 $c_o = c_b$，则激波绝热线在 $\mu = o$ 处与弹性方程(5-3-39)式相匹配。事实上，对于很多材料 c_o 大约等于 c_b。

5.3.4 单元应力偏量的计算

将方程(5-2-20)式两边对时间求导得

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{B}\,\dot{\boldsymbol{d}} \tag{5-3-41}$$

其中 $\dot{\varepsilon}$ 为应变率列向量，$\dot{d}$ 为节点速度分量列向量。由此式和(5-2-44)式可以根据节点速度计算出单元的应变率张量，然后由(5-3-3)至(5-3-8)式可以计算出该单元的应力偏量张量。

单元应力偏量的具体计算步骤如下：

(1) 按方程(5-3-24)和(5-3-25)式计算该单元的材料屈服强度 Y。

(2) 由节点速度计算单元的应变率张量，应变率偏量张量及应力偏量张量。

(3) 按(5-3-17)式计算单元的有效应力 σ_e。

(4) 如果 $\sigma_e \leqslant Y$，则材料处在弹性范围内，那么第 2 步中，按弹性假设计算的应力偏量张量不需修改。

(5) 如果 $\sigma_e > Y$，说明该单元材料处于塑性状态，此时按比例缩小各应力偏量，将应力状态拉回到屈服面。

以上各步除第 5 步以外都比较直观，下面进一步分析一下第 5 步，看这样处理与所采用的材料本构关系有无矛盾。

由于塑性应变能增量只能为正或零，所以塑性应变增量必定垂直于屈服面，因而屈服准则及塑性流动规律之间必有对应关系。可以证明和 Von Mises 屈服准则对应的就是 Prandtl—Reuss 流动律，也可以反过来说，Prandtl—Reuss 流动律隐含了 Von Mises 屈服准则。

下面首先证明“按比例减小应力偏量张量各分量，将应力状态拉回到屈服面”在 Von Mises 屈服准则条件下就等于把应力状态“沿屈服面的法线方向拉回到屈服面”。

应力偏量张量共有 9 个分量 $S_{ij}(i,j=r,z,\theta)$，所以屈服面是在 9 维空间中的曲面。如果采用 Von Mises 屈服准则，则屈服面的方程为

$$F(S_{ij}) = S_{ij}S_{ij} - \frac{2}{3}Y^2 = 0$$

设屈服面上有一点 A，其坐标为 $(S_{ij})_A$，则过 A 点的屈服面的法线方程为

$$\frac{S_{ij} - (S_{ij})_A}{[F'(S_{ij})]_A} = \frac{S_{ij} - (S_{ij})_A}{2(S_{ij})_A} = C_A$$

其中$[F'(S_{ij})]_A$为屈服函数对S_{ij}的导数在A点的值,C_A为常数。

上式可以改写成

$$S_{ij} = (2C_A + 1)(S_{ij})_A$$

或
$$(S_{ij})_A = S_{ij}/(2C_A+1) \tag{5-3-42}$$

可见在 Von Mises 屈服准则下,如果应力状态跑到屈服面的外面,那么垂直地拉回到屈服面的方法,应该是按比例缩小各应力偏量。

下面证明"按比例减小各应力偏量将应力状态拉回到屈服面"的处理方法,符合 Prandtl—Reuss 流动律。

在有塑性增量的情况下,应变率可分解成弹性应变率和塑性应变率两部分,即

$$\dot{e}_{ij} = \dot{e}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p$$

其中$\dot{e}_{ij}$和$\dot{e}_{ij}^e$分别为总应变率偏量张量和弹性应变率偏量张量,$\dot{\varepsilon}_{ij}^p$为塑性应变率张量。弹性部分满足虎克定律,塑性部分满足 Prandtl—Reuss 流动律,即

$$\dot{e}_{ij} = \frac{\dot{S}_{ij}}{2G} - d\lambda S_{ij}$$

其中$d\lambda$为常数,两边乘时间步长Δt得

$$\Delta e_{ij} = \frac{S_{ij}^{t+\Delta t} - S_{ij}^t}{2G} + d\lambda S_{ij}^t \Delta t$$

上标t和$t+\Delta t$分别表示t时刻和$t+\Delta t$时刻的量,上式整理后可得

$$\begin{aligned} S_{ij}^{t+\Delta t} &= S_{ij}^t + 2G\Delta e_{ij} - 2Gd\lambda S_{ij}^t \Delta t \\ &= (S_{ij}^t + 2G\Delta e_{ij})(1 - 2Gd\lambda\Delta t) + 4G^2 d\lambda \Delta e_{ij} \Delta t \\ &= (S_{ij}^t + 2G\Delta e_{ij})(1 - 2Gd\lambda\Delta t) + 4G^2 d\lambda \dot{e}_{ij} \Delta t^2 \end{aligned} \tag{5-3-43}$$

在程序中,具体的计算方法是首先假设应力状态在弹性范围,并按虎克定律试算新的应力偏量张量

$$(S_{ij}^{t+\Delta t})_{tr} = S_{ij}^t + 2G\Delta e_{ij}$$

求出有效应力

$$\sigma_e = \sqrt{\frac{3}{2}(S_{ij}^{t+\Delta t})_{tr}(S_{ij}^{t+\Delta t})_{tr}}$$

然后检查应力状态,并作如下处理

$$\left.\begin{aligned} S_{ij}^{t+\Delta t} &= (S_{ij}^{t+\Delta t})_{tr} & (\sigma_e \leqslant Y) \\ S_{ij}^{t+\Delta t} &= (S_{ij}^{t+\Delta t})_{tr} \frac{Y}{\sigma_e} & (\sigma_e > Y) \end{aligned}\right\} \tag{5-3-44}$$

(5-3-43)式中右边第一括号内的两项和就等于(5-3-44)式中的$(S_{ij}^{t+\Delta t})_{tr}$,第二括号内和(5-3-44)式中的$Y/\sigma_e$类似,也是一个常数。最后一项含$\Delta t^2$,是二阶小量,在一级近似下,可以忽略。

从以上分析可以看出,在一级近似下"按比例减小各应力偏量,将应力状态拉回到屈服面"的作法是符合 Prandtl—Reuss 流动律的。

5.3.5 单元压力和内能的计算

由于压力的计算方程中含有内能,而内能的增量又决定于压力,在 DEFEL 中采用同时计算压力和内能的方法。

从 t 时刻到 $t+\Delta t$ 时刻内能的增量为

$$E^{t+\Delta t} - E^{t} = -0.5[(P+Q)^{t} + (P+Q)^{t+\Delta t}]\dot{\varepsilon}_{V}\Delta t + \Delta E_{d} \tag{5-3-45}$$

其中 Q 为人工粘性，$\dot{\varepsilon}_V$ 为体应变率，ΔE_d 为应变能。

人工粘性是为消除局部振荡而加入的，它包括一次项和二次项两部分

$$\begin{aligned} Q &= c_1\rho c_3 h|\dot{\varepsilon}_V| + c_2\rho h^2(\dot{\varepsilon}_V)^2 \qquad (\dot{\varepsilon}_V < 0) \\ Q &= 0 \qquad (\dot{\varepsilon}_V \geqslant 0) \end{aligned} \tag{5-3-46}$$

其中 c_1 和 c_2 为无量纲系数，一般取 $c_1=0.5$，$c_2=4$，ρ 为材料密度，c_s 为声速，h 为该单元的最小高（即三角形最长边上的高）。

应变能 $\Delta E_d=(\overline{S}_{ij}\dot{e}_{ij})\Delta t$，其中 $\overline{S}_{ij}$是 t 和 $t+\Delta t$ 时刻应力偏量张量的平均值。

将方程(5-3-34)和(5-3-35)式代入(5-3-45)式得

$$E^{t+\Delta t} = E^{t} - 0.5[(P+Q)^{t} + Q^{t+\Delta t} + P_V^{t+\Delta t} + \rho_0\gamma_0 E^{t+\Delta t}]\dot{\varepsilon}_V\Delta t + \Delta E_d$$

整理后可得

$$E^{t+\Delta t} = \frac{E^{t} - 0.5[(P+Q)^{t} + Q^{t+\Delta t} + P_V^{t+\Delta t}]\dot{\varepsilon}_V\Delta t + \Delta E_d}{1 + 0.5\rho_0\gamma_0\dot{\varepsilon}_V\Delta t} \tag{5-3-47}$$

其中 P_V 的值按(5-3-35)式计算。将求得的 $E^{t+\Delta t}$代入(5-3-34)式就可以求出压力 P。

5.3.6 时间步长的计算

前面已经提到 DEFEL 的差分格式是条件稳定的，为了保证计算精度和稳定性，必须对时间步长加以控制。在保证稳定性和精度的情况下，应尽量把步长取大，以减少机时消耗和节约经费。

时间步长是按每个单元进行计算的，然后取它们的最小值。计算公式如下

$$\Delta t = c_t\left[\frac{h}{\sqrt{g^2} + \sqrt{g^2 + c_s^2}}\right] \tag{5-3-48}$$

其中 $g=c_2Q/\rho$，其参数的意义可参看(5-3-46)式，h 仍为三角形单元的最小高，c_s 为声速。对于固体和液体声速为

$$\begin{aligned} c_s^2 = \frac{1}{\rho_0}[&k_1(1-\gamma\mu) + k_2(2\mu - 1.5\gamma\mu^2) \\ &+ k_3(3\mu^2 - 2\gamma\mu^3) + \gamma E + \gamma\overline{P}/(1+\mu)] \end{aligned} \tag{5-3-49}$$

其中 k_1,k_2,k_3 为材料常数，$\overline{P}=P-Q$，E 为比内能。对于爆炸产物取

$$c_s^2 = \frac{\gamma\overline{P}}{\rho} \tag{5-3-50}$$

c_t 为小于 1 的数，以保证求得的 Δt 小于按声速通过单元最小高的时间，这样作也保证了 Δt 等于系统的最小振动周期[10]。

5.3.7 节点集中力的计算

DEFEL 程序主要是用来计算大塑性变形问题，所考虑的问题远远超出线弹性范围，所以无法计算各单元的刚度矩阵，而是采用下面的运动方程

$$M_i\ddot{d}_i^t = \sum_{g} F_{ij}^t \tag{5-3-51}$$

其中 m_i 为第 i 节点的质量，$\ddot{d}_i$ 是该节点在 t 时刻的加速度，F_{ij}^t 为 t 时刻单元 j 对节点 i 的集中力的贡献，j 的范围取决于与节点 i 相连的单元数。

下面讨论单元弹性应力对其节点集中力的贡献。

节点集中力是根据静力平衡来计算的，取该单元作分离体，于是边界上的应力变成了相应大小和方向的外力（见图 5-3-1），那么根据静力平衡可以求出与之相应的节点集中力。

为了方便，对于平面问题使用 $x-z$ 坐标，对轴对称问题则采用 $r-z$ 坐标。

$$F_{ix①}=F_{jx①}=+\frac{\delta}{2}\sigma_x(Z_i-Z_j)+\frac{\delta}{2}\tau_{zx}(X_j-X_i) \tag{5-3-52}$$

$$F_{ix③}=F_{jx③}=-\frac{\delta}{2}\{\sigma_x(Z_i-Z_m)+\tau_{zx}(X_m-X_i)\} \tag{5-3-53}$$

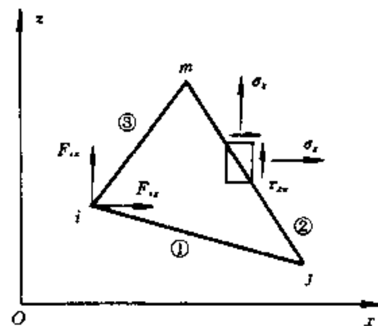


图 5-3-1　节点集中力的计算

其中 X 和 Z 为节点的 x、z 坐标，δ 为厚度，$F_{ix①}$ 表示与单元的 ij 边上外力相应的节点 i 的 x 方向集中力。那么，节点 i 在 x 方向的总集中力为

$$F_{ix}=F_{ix①}+F_{ix③}=\frac{\delta}{2}\{\sigma_x(Z_m-Z_j)+\tau_{zx}(X_j-X_m)\} \tag{5-3-54}$$

同理
$$F_{iz}=\frac{\delta}{2}\{\sigma_z(X_j-X_m)+\tau_{zx}(Z_m-Z_j)\} \tag{5-3-55}$$

对于二维轴对称情况，各单元均为一截面为三角形的圆环。图 5-3-2 所示为在垂直于 z 轴的平面内此圆环的一小段，图中 $\bar{r}$ 为三角形的中心的半径，σ_θ 为环向拉应力。那么环向拉力 $A\sigma_\theta$ 所产生的径向力为 $-2A\sigma_\theta \text{Sin}\frac{\mathrm{d}\theta}{2}\approx -A\sigma_\theta\mathrm{d}\theta$，如果将此力均匀地分配到三个节点，那么每个节点因环向拉应力面引起的径向集中力为 $-\frac{A}{3}\sigma_\theta\mathrm{d}\theta$，那么(5-3-54)式在轴对称情况下可以改写成

$$\mathrm{d}F_r=\frac{\bar{r}\mathrm{d}\theta}{2}\{\sigma_r(Z_m-Z_j)+\tau_{rz}(R_j-R_m)\}-\frac{1}{3}A\sigma_\theta\mathrm{d}\theta$$

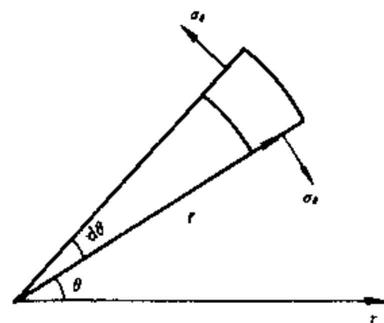


图 5-3-2　环向垂直应力 σ_θ 对节点集中力的贡献

积分得

$$F_{ir}=\pi\bar{r}\{\sigma_r(Z_m-Z_j)+\tau_{rz}(R_j-R_m)\}-\frac{2}{3}\pi A\sigma_\theta \tag{5-3-56}$$

同理可以写出（注意 σ_θ 对 z 方向集中力无贡献）

$$F_{iz}=\pi\bar{r}\{\sigma_z(R_j-R_m)+\tau_{rz}(Z_m-Z_j)\} \tag{5-3-57}$$

用类似的方法还可以求得

$$F_{i\theta}=\pi\bar{r}\{\tau_{r\theta}(Z_m-Z_j)+\tau_{z\theta}(R_j-R_m)\}$$

但是，由于 $\tau_{r\theta}$ 在任一单元中不可能为常数，从平衡方程[6]

$$\frac{\partial\tau_{r\theta}}{\partial r}+\frac{2\tau_{r\theta}}{r}=0$$

很容易看出这一点。参考文献[5]的作者 G·R·Johnson 采用一个因子$\bar{r}/r_i$，于是上式变成

$$F_{i\theta}=\pi\bar{r}\left\{\frac{\bar{r}}{r_i}\tau_{r\theta}(Z_m-Z_j)+\tau_{z\theta}(R_j-R_m)\right\} \tag{5-3-58}$$

用同样的方法可以计算该单元对另外两个节点 j 和 m 的集中力的贡献。而节点的总集中力分量是在所有与它相连的单元上求和得到的。

5.3.8 滑移面处理问题[5][7]

多材料块相撞问题，例如高速碰撞和侵彻，在交界面附近往往是高压和大变形区，处理好滑移面是至关重要的。处理得不好，不仅影响计算精度，甚至有可能面目皆非。

在处理交界面时，一般都把相接触的两材料块中的一块定作主块，另一块则称为从块。通常把密度大的一方定为主块，因为它有较大的惯性。主块和从块在接触面上的节点分别按顺序列成两组，它们构成了一个滑移面。在滑移面上主块和从块可以相对滑动，可以保持接触，也可以分开。

交界面处理的基本原则是，不允许一种材料块滑移面上的节点侵入到另一材料块的内部，这种情况一旦发生，就把该节点沿垂直方向拉回到第二块材料的交界面上去，并按动量、动量矩守恒及速度协调的原则调整有关节点的速度。

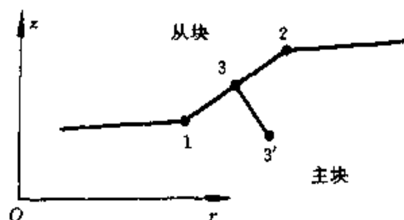


图 5-3-3 从块节点侵入主块内

图 5-3-3 示出某一时刻主块滑移线的一部分，1 和 2 为主块滑移线上的两节点，3′为侵入到主块内部的从块滑移面上的节点 3 的位置，在这种情况下，该从块节点就被沿连线$\overline{12}$的垂线方向拉到连线$\overline{12}$上，即 3 点的位置，那么节点 3 在$\overline{12}$的垂线方向的动量变化，应分摊到节点 1 和 2 上，以保证该方向上的动量守恒，其方程为

$$m_1v_1^{t+}+m_2v_2^{t+}+m_3v_3^{t+}=m_1v_1^{t-}+m_2v_2^{t-}+m_3v_3^{t-} \tag{5-3-59}$$

其中 m 代表节点质量，v^{t+}代表调整后的速度，v^{t-}代表调整前的速度，v^{t+}和 v^{t-}都是各节点在连线$\overline{12}$的法线方向的速度分量。

对 1 点的动量矩守恒方程可以写成

$$m_3v_3^{t+}l_{13}+m_2v_2^{t+}l_{12}=m_3v_3^{t-}l_{13}+m_2v_2^{t-}l_{12} \tag{5-3-60}$$

其中 l_{13}和 l_{12}分别表示 1、3 节点和 1、2 节点之间的距离。

此外节点 3 的速度应和线段$\overline{12}$上同一位置的速度相等，即

$$v_3^{t+}=v_1^{t+}+(v_2^{t+}-v_1^{t+})\frac{l_{13}}{l_{12}} \tag{5-3-61}$$

从(5-3-59)式~(5-3-61)式共三个方程，三个未知数，可以求出调整后的速度 v_1^{t+}，v_2^{t+} 和 v_3^{t+}。

在 5.3.7 一节已经讲过，节点集中力是由和它相连的各元素的贡献求和计算的，这对内部接点是合理的，但对于滑移面上的节点由于没有考虑同它相接触的另一块材料的贡献，因面导致两块材料的滑移面节点有较高的相对速度，这就使某些节点较深的侵入到另一块材料内部，尽管可以用上述方法拉到交界面上，但往往引起与这些节点相连的单元的体积的较大变化，高的体应变率又引起高的人工粘性和单元的比内能，甚至造成整个计算失败。所以 DEFEL 的作

者不仅在计算全部节点的速度和位移之后，对滑移面上节点的位置和速度进行调节，而且在计算全部节点的速度和位移之前，还对滑移面上节点的节点力进行调整，调整以后的节点力，使主块和从块交界面的邻近节点有大约相同的加速度，使两块材料界面的运动比较协调，侵入量大大减小，程序进行比较稳定。

节点力的调整是按下面的一组方程进行的(参看图 5-3-3)

$$\left.\begin{aligned}
&F_1 - \frac{l_{13}}{l_{12}}x = m_1 a_1 \\
&F_2 - \left(1 - \frac{l_{13}}{l_{12}}\right)x = m_2 a_2 \\
&F_3 + x = m_3 a_3 \\
&a_3 = a_1 + \frac{l_{13}}{l_{12}}(a_2 - a_1)
\end{aligned}\right\} \tag{5-3-62}$$

其中 F 为各节点的集中力在$\overline{12}$垂线方向的分量，a 为集中力调整后各节点在$\overline{12}$法线方向的加速度，x 为节点 3 和以节点 1、2 为端点的线段(刚性无质量杆)之间的作用力。

方程(5-3-62)式共四个方程、四个未知数，即 a_1, a_2, a_3 和 x。当这些未知数解出后，m_1a_1，m_2a_2，m_3a_3 就分别为新的各节点力在$\overline{12}$法线方向上的分量，而节点力在$\overline{12}$方向上的分量保持不变，那么，各节点的合力或在 r、z 方向的分力就可以求出来了。

5.3.9 大畸变处理方法之一——再分区[13]

一般学者都认为拉氏方法比欧拉方法有计算速度快、精度高、界面清楚等优点，但它也有它的严重缺点，那就是比较难以处理大变形区的网格畸变问题。畸变严重的三角形网格单元的边可能变得很长，而最小高却变得很小。大边长会引起计算误差的增加，小的最小高又引起时间步长的减小，机时消耗的增加。解决这一矛盾的比较直观和比较好的方法是进行再分区，用规则的网格代替畸变了的网格。

下面从几个方面来讨论 DEFEL 的再分区程序的特点。

一、再分时间及再分范围的确定

该再分区程序自动确定再分时间和再分范围。程序每隔一定数目的循环(或每个循环)检查一次各单元的形状，如果有的单元的最小高和其对应底边的比小于指定的值，那么该单元及与它相邻的单元就被列入再分范围，因此，是否再分及再分的范围都是由当时的网格变形情况决定的。由于只在局部而不是在整个网格上进行再分，因而不仅节省机时，而且可以尽量保持网格的拉格朗日特点。

二、产生新单元

再分范围确定之后，就开始自动建立新单元。对于每个再分区域，按下面的六步进行，前面两步是调整再分边界上的节点，使边界相邻节点的间距接近于标准三角形边长 L_a；后面四步是建立内部网格。

(1) 在对称轴上重新布节点

如果再分区域的部分边界与对称轴重合，那么除两个端节点外，对称轴上的中间节点全部删去，然后在此两端节点之间均匀地放上一定数目的节点，使相邻节点间距接近标准边长 L_a，这项措施对侵彻问题计算很重要，因为侵彻时孔底附近因压缩而使对称轴上的节点靠得很近。

(2) 在边界的长线段上增加新节点

如果再分区域的边界有的部分和该块材料的自由表面重合，那么在该部分边界上如果有的线段的长度大于$\sqrt{2}L_a$，就在该段的中点增加一个新节点，这样循环作下去，一直到所有的边长都小于$\sqrt{2}L_a$为止。

(3) 切掉锐内角

当边界节点布局确定之后，就开始从边界向里建立新单元、增加新节点。首先是切去锐内角，形成一个或两个新单元(见图5-3-4)。

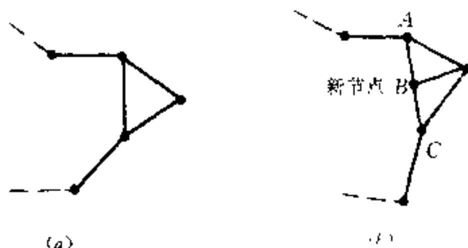


图5-3-4 切去锐内角



图5-3-5 平分钝内角

当新元素的内边边长小于$\sqrt{2}L_a$时(图中(a))，只形成一个新单元，反之则形成两个(图中(b))，此时在内边中点增加一个新节点。

(4) 二等分钝内角

当内角为钝角时，则按顺序二等分钝内角并在平分线上距角顶点L_a处增加一个新节点，然后建立两个新单元(见图5-3-5)。

(5) 把再分区域分成子区

在平分钝内角建立新单元的过程中，可能发生相遇现象，即产生的新节点可能很接近再分边界的另一部分，此时需将再分区域分成两个子区，然后从较小的子区开始逐个再分(参看图5-3-6)。

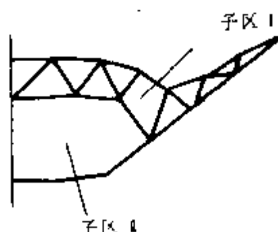


图5-3-6 分成子区

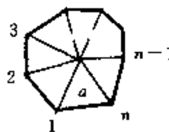


图5-3-7 优化新网格

(6) 结束一个角分区域

在执行上述从3至5的过程中，再分边界从原始边界不断向内收缩，当减少到只剩下三边和四边时，就采取措施结束该区再分。如果只剩下三边，则建立最后一个新单元，如果剩下四边

，则根据边长和角度分成两个或四个新单元。

三、内部节点位置的优化

一个再分区域的新网格形成后，还要使各新单元的面积尽量相等，为此要调整节点位置进行优化。

图 5-3-7 所示为和节点 a 相连的几个单元，用 A_i 表示第 i 个单元的面积，则 n 个单元的平均面积 A_{av}为

$$A_{av} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A_i \tag{5-3-63}$$

用最小二乘法，使$(A_{av}-A_i)^2$总和最小，从而确定 a 点新坐标。依次对再分区域内的各个节点进行优化处理，使得单元面积较为一致。

四、计算新单元及节点参数

新单元的参数是根据同其相交的所有旧单元(再分前的单元)的参数按重叠体积加权的方法计算的，即对任意单元参数 M(例如质量、内能等)有

$$M' = \sum_{i=1}^{n} \frac{V'_i}{V_i} M_i \tag{5-3-64}$$

式中 M'是新单元的 M 参量，M_i 是第 i 个与该新单元重叠的旧单元的 M 参量，V_i 为该旧单元的体积，V'_i 为它与新单元重叠的体积。

节点质量的计算和求初始网格节点质量的方法相同。

节点的速度先根据在旧网格中的位置按形函数内插求出，这样可以基本保持再分前的速度分布，然后按照再分区的总动量守恒的原则进行第一次调整，再按再分区的总动能守恒原则进行第二次调整，最后确定节点速度。

五、再分区计算实例

按前面所述方法编制的 DEFEL 再分区程序的工作情况令人满意。图 5-3-8 到图 5-3-12 为铜弹丸侵彻钢靶不同时刻的网格变形图。图 5-3-8 为初始网格，图上标有尺寸比例和弹丸初速。图 5-3-9 为侵彻约 3μs 时的网格，可以清楚地看出，由于使用了再分区，孔底附近大变形区的网格相当规则。图 5-3-10 为侵彻到约 6.16μs 时网格，图中空白部分是程序自动确定的再分区范围。图 5-3-11 和图 5-3-12 分别为再分区范围内的旧网格和再分形成的新网格，可以清楚地看出，再分形成的新网格远比原来的网格规则。

参考文献[13]还把用再分区计算的结果，同用侵蚀法(Erosion)计算的结果进行了对比，证明了用再分区计算的结果比后者好的多。

5.3.10 大畸变处理方法之二——侵蚀法

F·P·Stecher 和 G·R·Johnson 在 EPIC—2 程序中使用了侵蚀法[14]。该法是将交界面上的大畸变单元去掉，其质量或者附在邻近单元的节点上去或者不加处理，任其自由运动。

DEFEL 程序在用侵蚀法计算深侵彻问题时，把射流(或弹丸)和靶板的侵蚀掉的质量和动量都附到孔壁的邻近节点上。

用侵蚀法计算射流深侵彻时，取得一定的成功，计算的穿深—时间曲线与实际比较一致，图 5-3-13 是 DEFEL 程序采用侵蚀法计算的射流深侵彻孔形，看上去是不错的。

侵蚀法要去除交界面上的大畸变单元，这些单元往往处于孔底附近的高压、高应变率区

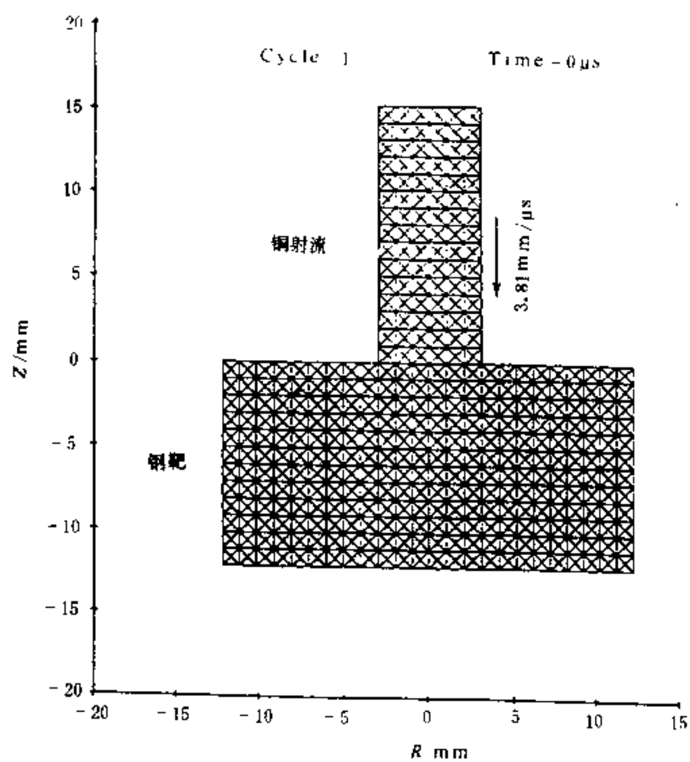


图 5-3-8 初始有限元网格

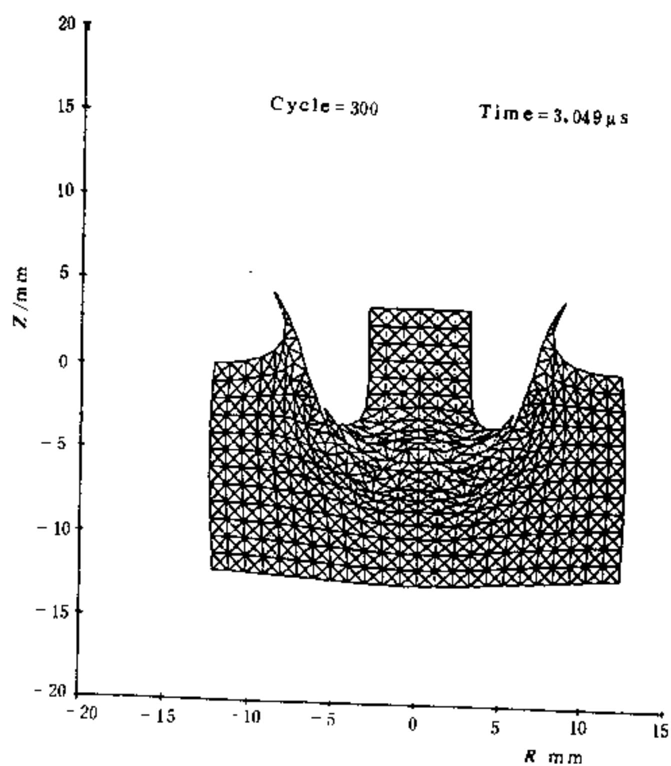


图 5-3-9 侵彻到 3.049μs 时的网格

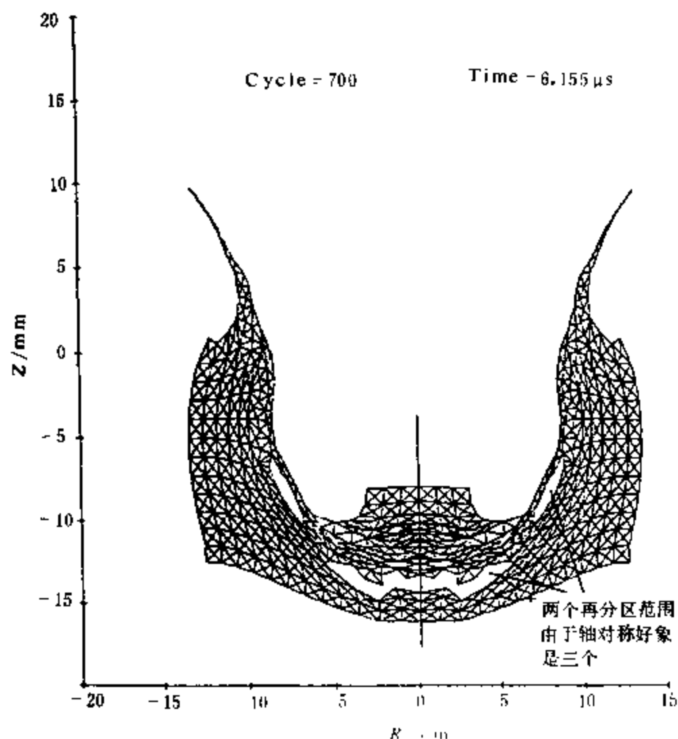
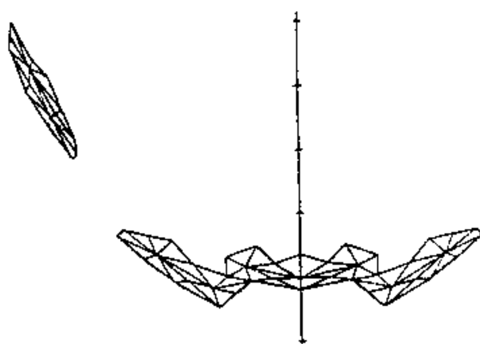


图 5-3-10　侵彻到 6.155μs 时的网格(空白部位为再分区域)



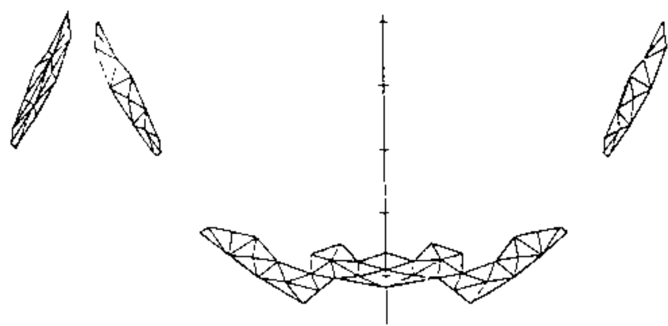


图 5-3-11　再分前再分区域的畸变网格　　5-3-12　再分后形成的规则网格

域,单元去除后形成空穴和压力释放,接着后面的没有侵蚀掉的单元又进入接触和碰撞,在大畸变后又被侵蚀,这样就把一个连续的侵彻过程变成了间断地撞击,这在物理概念上与真实过程差别很大。

DEFEL 程序在用再分区方法计算深侵彻时,也采用了侵蚀法来侵蚀掉射流翻转后粘到孔壁上的薄层。众所周知,该薄层压力很低,速度也很低,去除以后不会对计算结果产生明显影响。在孔底附近的高压区,则采用再分的方法来消除大畸变而不采用侵蚀法。

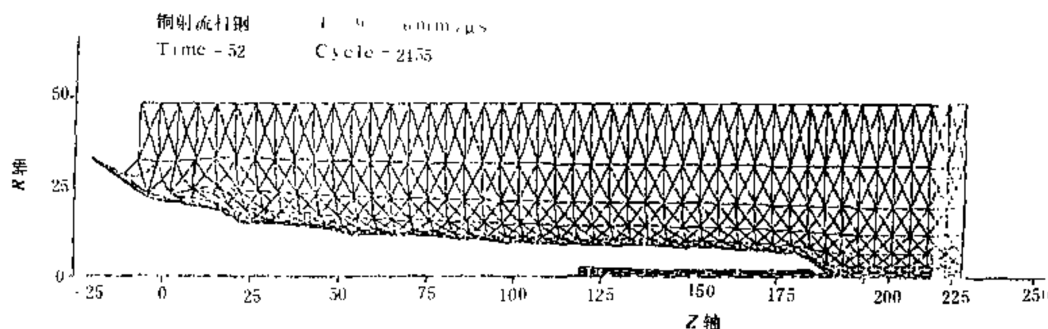


图 5-3-13 用侵蚀法计算的射流深侵彻孔形

§5.4 DEFEL 程序的应用情况

DEFEL 程序是在 EPIC—2 的基础上发展而成的，它已被用来成功地计算了高速撞击及炸药—金属相互作用方面的一系列终点弹道问题。由于它有比较完善的滑移面和再分区程序，它可以用来计算像射流深侵彻及射流形成这类大畸变问题，其他拉氏程序则很难作到这一点。DEFEL 已被用来计算了下列几方面的问题：

1. 弹丸低速撞击薄靶板

撞击速度为 270m/s，其他参数见图 5-4-1，图 5-4-2 为从撞击开始 1000μs 后的变形图。该计算的目的确定不同时刻弹内的应力分布。

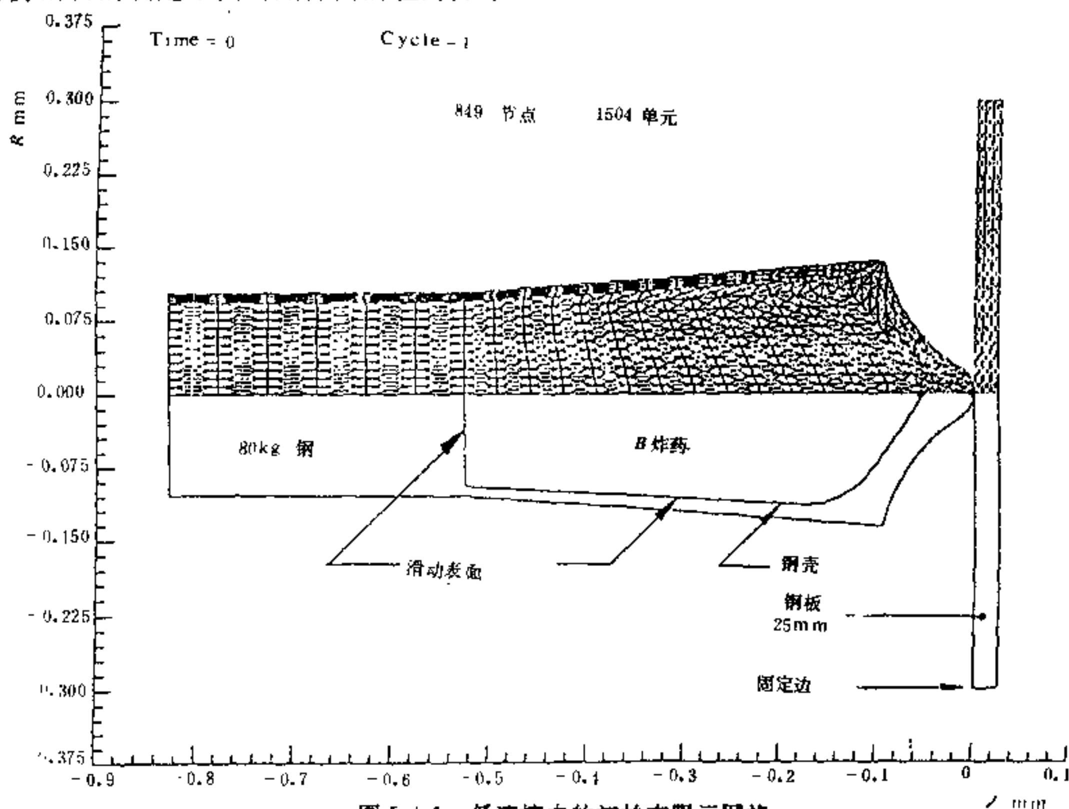


图 5-4-1 低速撞击的初始有限元网格

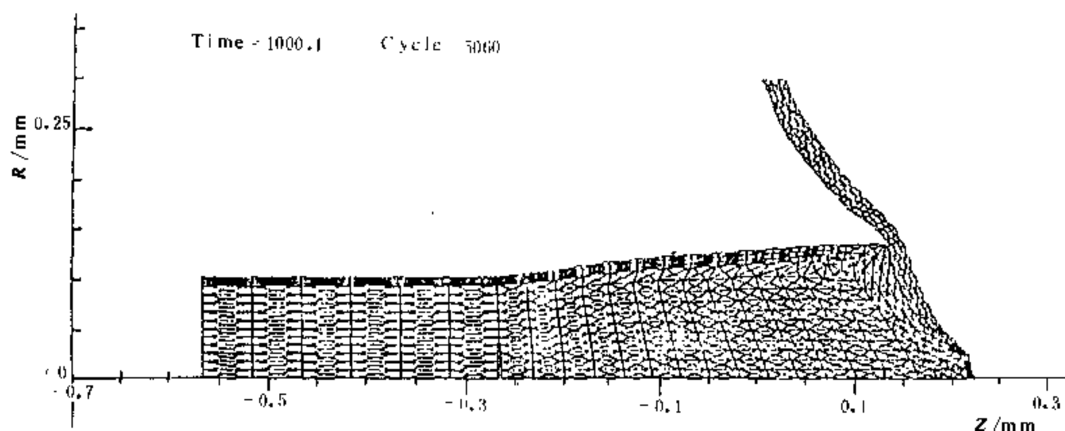
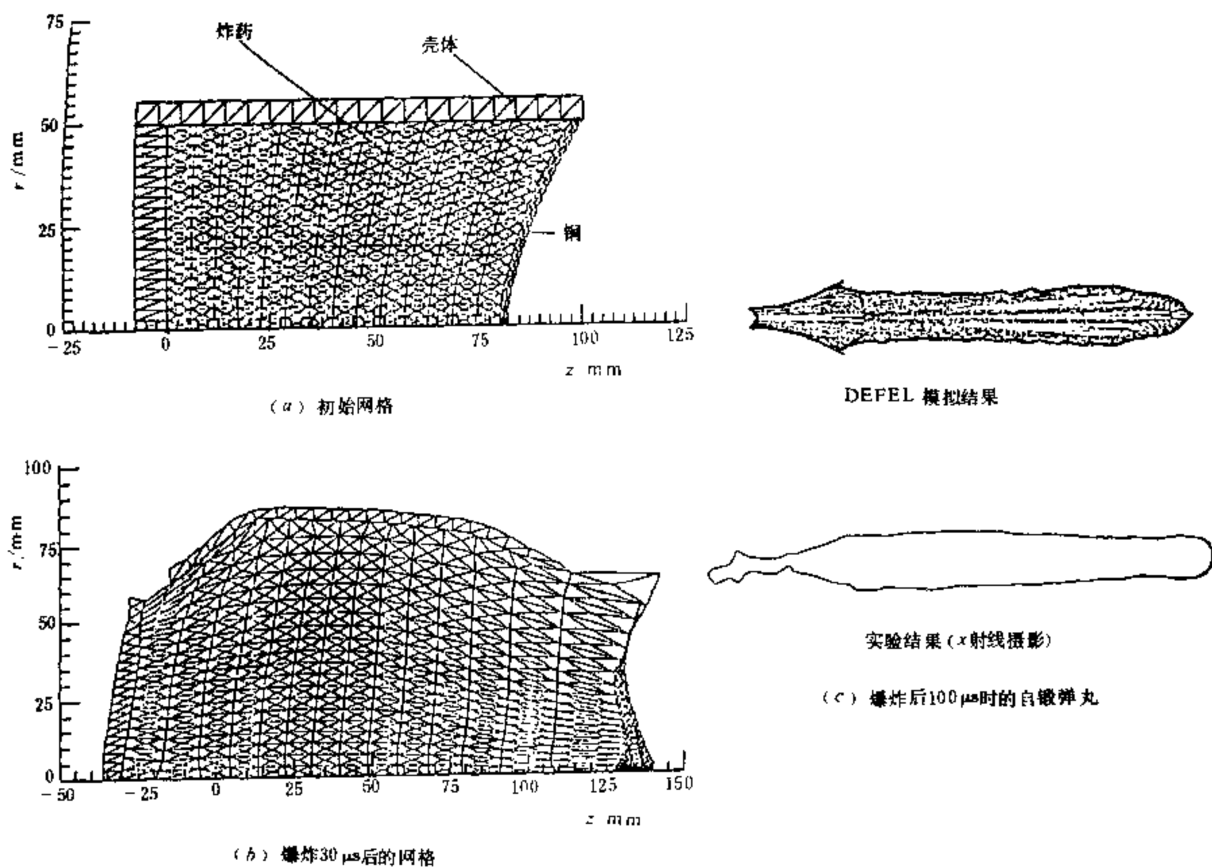


图 5-4-2 撞击 1000μs 后的变形图



（a）初始网格

（b）爆炸30 μs后的网格

（c）爆炸后100 μs时的自锻弹丸

图 5-4-3 自锻破片形成过程

2. 自锻弹丸形成过程

图 5-4-3 是对自锻弹丸形成过程的计算结果，采用球壳形铜罩，图中（a）为初始网格，（b）为引爆后 30μs 时的变形图。图中还把计算的弹丸形状同脉冲×光照片进行对比，可以看出形状比较一致。

本结果是在研究再分区程序之前计算的，如是在之后并用上再分区程序，相信结果会更

好些。

3．采用再分区法对射流深侵彻过程的计算

图5-4-4，图5-4-5及图5-4-6是使用再分区程序对射流侵彻过程的计算结果，图5-4-4是初始网格，图5-4-5和图5-4-6是放大了的侵彻过程图。从图5-4-5可以清楚地看出由于进行了再分区，孔底附近单元形状很规则，孔壁也是这样；还可以看出孔底呈规则的弧形，与实验结果相符。计算的侵彻速度同按不可压缩流体处理的理论结果十分一致，而在计算使用的钢射流速度范围内（头部速度为9km/s，尾部速度为7.875km/s，中间线性分布）不可压缩流体假设下的理论结果同实验结果符合得很好。

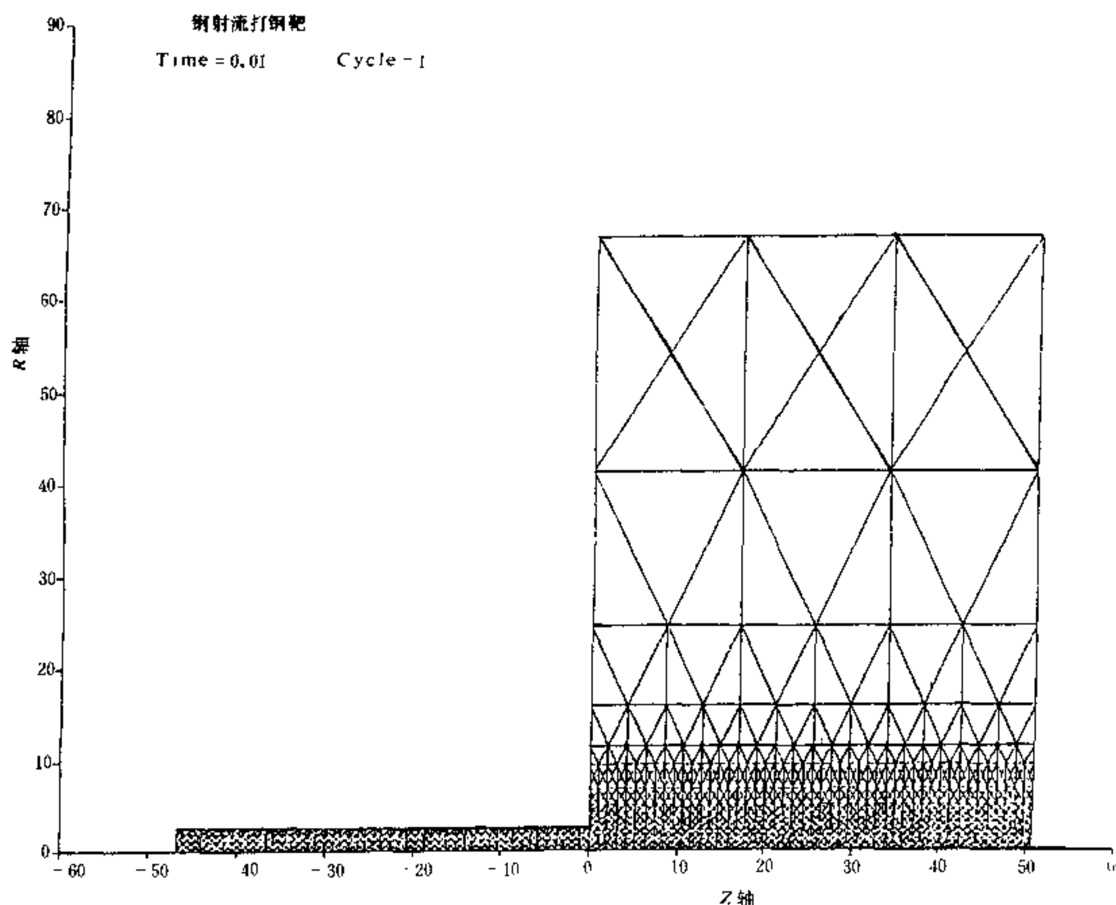


图5-4-4　射流侵彻初始网格

4．层裂的计算

参考文献［12］中介绍了用DEFEL程序对一个薄圆钢板以3km/s的速度撞击另一钢板时，钢板背面产生层裂的计算结果（见图5-4-7）。从图可以看出基本趋势与实验一致。

评价一个程序的优劣必须把该程序同其他程序进行全面的对比，这是一件很困难的工作，这里仅就使用DEFEL程序的体会谈点看法。

(1) DEFEL是拉氏程序。同欧拉程序相比，拉氏程序具有逻辑简单、易于掌握和修改，运

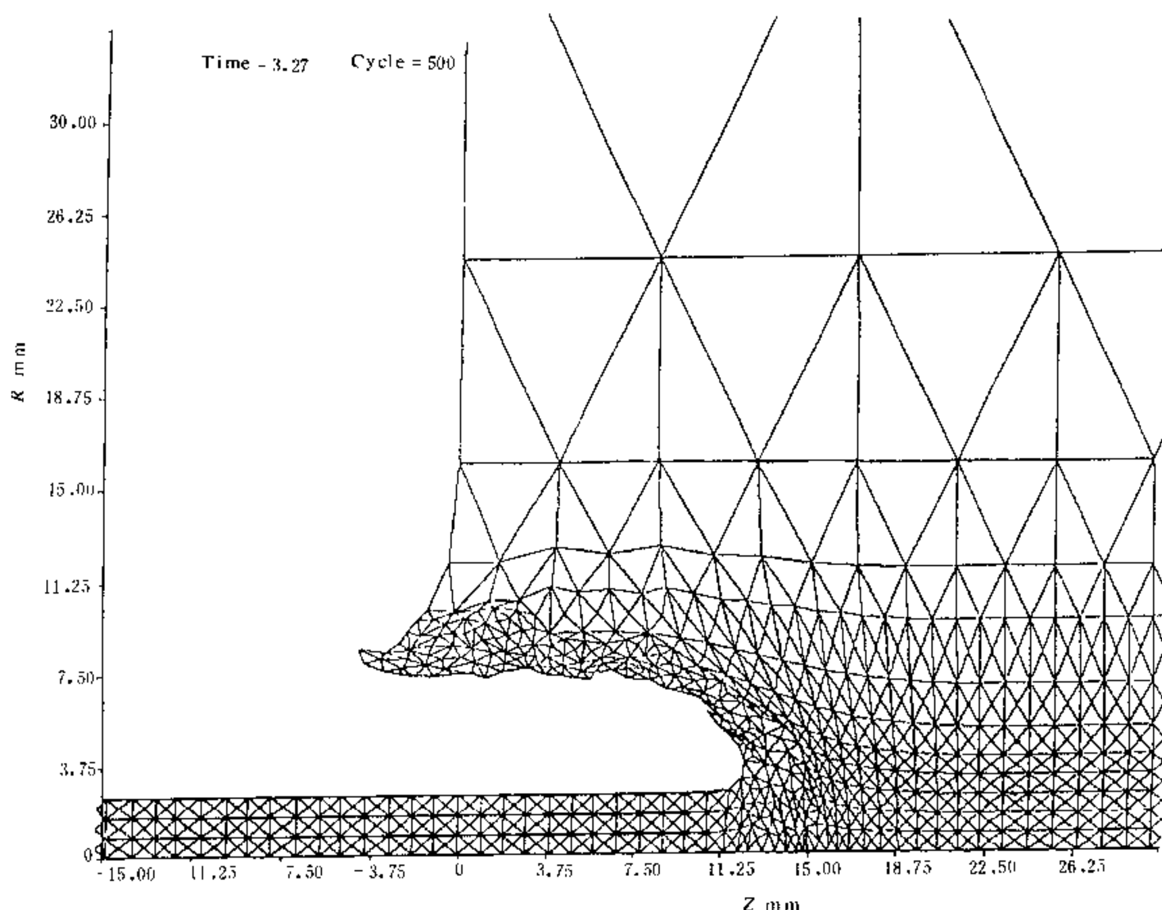


图 5-4-5 侵彻到 3.27μs 的图形

算速度快，界面清楚等优点。

(2) DEFEL 程序采用三角形网格，在计算大变形问题时比较稳定。这是因为三角形单元的一个节点在靠近对边时，单元的体积会显著变小从而产生很大的抗力；四边形单元则没有这一特点，所以容易出现负体积单元而使计算无法进行。

采用三角形单元的另一优点是初始网格及再分区域新网格的生成灵活、容易自动进行。

有不少学者认为三角形单元僵硬，易产生病态。但如果采取措施（例如再分）保持网格规则，这种问题可以在很大程度上被减弱。

(3) DEFEL 程序的滑移面及再分区子程序比较成功，所以它虽为拉氏程序，却可以用来计算象射流侵彻这类大畸变问题。

(4) 程序在保持场内能量守恒方面不够理想，HELP 程序可以保证总能变化小于千分之一，而 DEFEL 则比此高一、两个数量级。

(5) 网格中单元的方位特征，即网格的初始设置，有时对计算结果有影响。

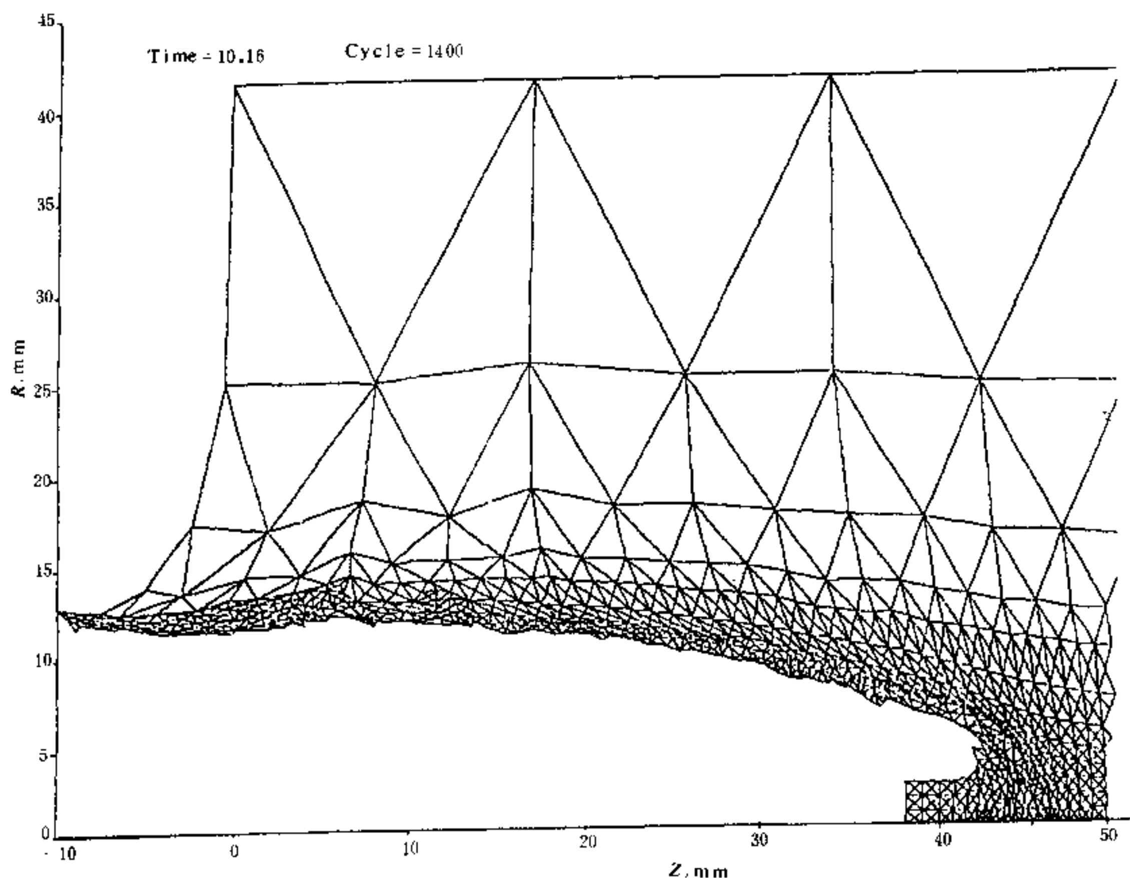


图 5-4-6 侵彻到 10.16μs 时的变形图

§5.5 DYNA 程序

DYNA 程序包括 DYNA2D 和 DYNA3D，由美国 Lawrence Livermore National Laboratory 的 H. O. Hallquist 主持研究开发，从 70 年代面世以后，经历了许多版本，至今已较为成熟。

该程序应用有限元方法计算非线性结构材料的大变形动力响应。DYNA2D 采用四节点单元进行离散化，处理轴对称和平面应变问题。DYNA3D 采用四、六、八节点单元进行空间离散化，用于三维计算。DYNA 程序使用单点高斯积分，引入沙漏粘性控制零能模态，并应用中心差分法进行时间积分。它的接触-撞击算法（contactimpact algorithm）可以处理材料交界面的缝隙和滑动，它所提供的多种材料模型和状态方程，以及功能齐全的输入输出处理模块，使得该程序在爆炸-冲击问题数值计算方面，具有相当的实用价值。

5.5.1 控制方程组

一、坐标描述

引入拉格朗日描述，t 时刻物体构形为

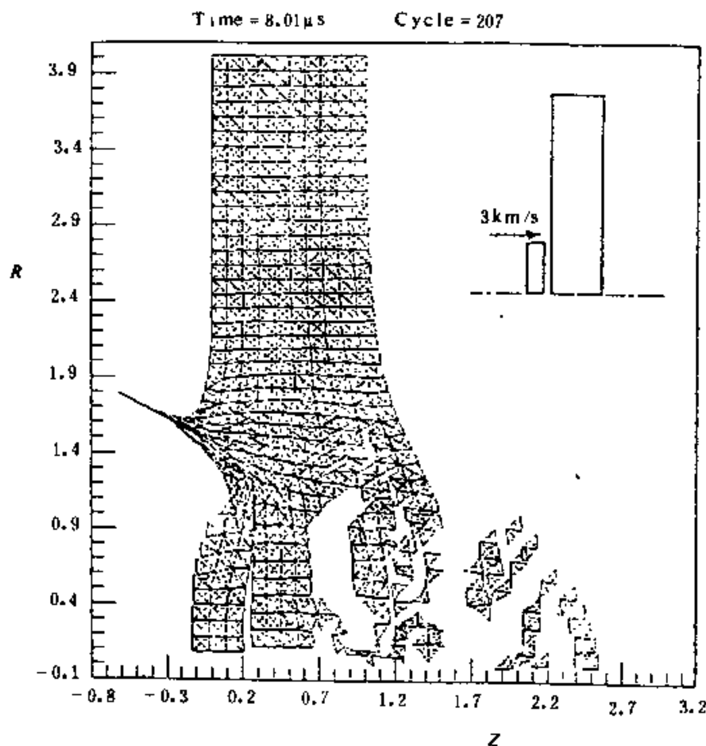


图 5-4-7 撞击层裂的计算结果

$$x_i = x_i(X_j, t) \qquad (i, j = 1,2,3 \text{ 下同}) \tag{5-5-1}$$

其中 x_i 是质点在固定直角坐标系中的坐标，X_j 为质点的物质坐标。取 $t=0$ 时刻物体的构形为参考构形，有初始条件

$$x_i(X_j, 0) = X_i \tag{5-5-2}$$

$$\dot{x}_i(X_j, 0) = v_i(X_j) \tag{5-5-3}$$

其中 v_i 定义了质点 X_j 的初始速度。

二、动量方程

$$\sigma_{ij,j} + \rho f_i = \rho \ddot{x}_i \tag{5-5-4}$$

式中 σ_{ij}、ρ、f_i、$\ddot{x}_i$ 分别为柯西应力、当前密度、单位质量体积力、质点加速度。

如图 5-5-1 所示，动量方程在外面力边界 S_1 上满足

$$\sigma_{ij} n_j = t_i(t) \tag{5-5-5}$$

其上 n_j 为 S_1 面外法向余弦，t_i 为外面力。

动量方程在位移约束边界 S_2 上满足

$$x_i(X_j, t) = D_i(t) \tag{5-5-6}$$

这里 D_i 是位移约束。

动量方程在间断接触交界面 S_3 上满足

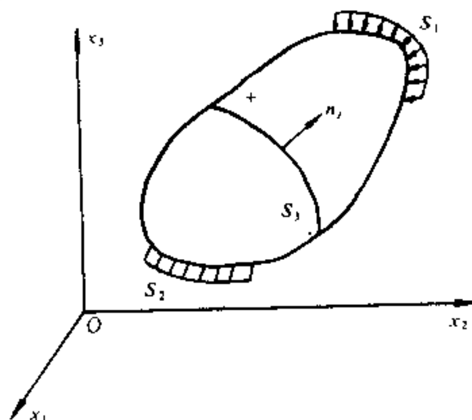


图 5-5-1 动量方程计算图

$$(\sigma_{ij}^{+} - \sigma_{ij}^{-})n_j = 0 \tag{5-5-7}$$

三、质量守恒方程

$$\rho V = \rho_o \tag{5-5-8}$$

其中 ρ_0 为初始密度，$V = |F_{ij}|$ 为相对体积，而

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j}$$

为变形梯度。

四、能量方程

$$\dot{E} = VS_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij} - (p+q)\dot{V} \tag{5-5-9}$$

$$S_{ij} = \sigma_{ij} + (p+q)\delta_{ij} \tag{5-5-10}$$

$$p = -\frac{1}{3}\delta_{kk} - q \tag{5-5-11}$$

其中 V 为现时构形体积，$\dot{\epsilon}_{ij}$为应变率张量，q 是体积粘性，S_{ij}为偏应力，p 是压力，而 δ_{ij}是 Kronecker 记号。

五、虚功方程

守恒方程的弱解形式为

$$\int_V (\rho\ddot{x}_i - \sigma_{ij,j} - \rho f_i)\delta x_i \mathrm{d}V + \int_{S_1}(\sigma_{ij}n_j - t_i)\delta x_i \mathrm{d}S + \int_{S_3}(\sigma_{ij}^{+} - \sigma_{ij}^{-})n_j\delta x_i \mathrm{d}S = 0 \tag{5-5-12}$$

式中 V 为现时构形，δx_i 在 S_2 上满足位移边界条件。由散度定理

$$\int_V (\sigma_{ij}\delta x_i)_{,j}\mathrm{d}V = \int_{S_1}\sigma_{ij}n_j\delta x_i \mathrm{d}S + \int_{S_3}(\sigma_{ij}^{+} - \sigma_{ij}^{-})n_j\delta x_i \mathrm{d}S$$

及

$$(\sigma_{ij}\delta x_i)_{,j} - \sigma_{ij,j}\delta x_i = \sigma_{ij}\delta x_{i,j}$$

得到虚功方程

$$\delta\Pi = \int_V \rho\ddot{x}_i\delta x_i \mathrm{d}V + \int_V \sigma_{ij}\delta x_{i,j}\mathrm{d}V - \int_V \rho f_i\delta x_i \mathrm{d}V - \int_{S_i} t_i\delta x_i \mathrm{d}S = 0 \tag{5-5-13}$$

六、应力应变描述

在参考坐标系中，通常用 Green 应变 E_{ij}来度量；在现时坐标系中，则一般用 Signouni 应变 e_{ij}度量。

E_{ij}和 e_{ij}可由变形梯度计算得到

$$E_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial x_k}{\partial X_i}\frac{\partial x_k}{\partial X_j} - \delta_{ij}\right) \tag{5-5-14.1}$$

$$e_{ij} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ij} - \frac{\partial X_k}{\partial x_j}\frac{\partial X_k}{\partial x_j}\right) \tag{5-5-14.2}$$

考虑到

$$\mathrm{d}x_i = \left(\delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial X_j}\right)\mathrm{d}X_j \tag{5-5-15.1}$$

$$\mathrm{d}X_j = \left(\delta_{ij} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)\mathrm{d}x_j \tag{5-5-15.2}$$

容易得到

$$E_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j}+\frac{\partial u_j}{\partial X_i}+\frac{\partial u_k}{\partial X_i}\frac{\partial u_k}{\partial X_j}\right) \tag{5-5-16.1}$$

$$e_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}-\frac{\partial u_k}{\partial X_i}\frac{\partial u_k}{\partial X_j}\right) \tag{5-5-16.2}$$

小变形时，忽略二阶小量，并认为 $x_i=X_i$，则

$$E_{ij}=e_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j}+\frac{\partial u_j}{\partial X_i}\right) \tag{5-5-17}$$

与应变量相对应，应力通常有两种描述形式，在参考系中，采用第二类 Piola-Kischoff 应力张量 T_{ij}来度量；而在现时构形中采用 Cauchy 应力张量 σ_{ij}来度量。

这两种应力度量之间的关系为

$$\sigma_{ij}=\frac{\rho}{\rho_0}\frac{\partial x_i}{\partial X_k}\frac{\partial x_j}{\partial X_m}T_{km} \tag{5-5-18.1}$$

$$T_{ij}=\frac{\rho_0}{\rho}\frac{\partial X_i}{\partial x_k}\frac{\partial X_j}{\partial x_m}\sigma_{km} \tag{5-5-18.2}$$

七、材料模型

（1）各向同性弹性材料　考虑到结构有大变形和大转动，采用 Jaumann 应力率

$$\overset{\triangledown}{\sigma}_{ij}=\dot{\sigma}_{ij}-\sigma_{ik}\Omega_{kj}-\sigma_{jk}\Omega_{ki}$$

式中

$$\Omega_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i}-\frac{\partial v_i}{\partial x_j}\right)$$

是旋转张量。由于是各向同性材料，故本构方程为

$$\begin{aligned}\overset{\triangledown}{\sigma}{}_{ij}^{n+\frac{1}{2}}&=C_{ijkl}^{n+\frac{1}{2}}\dot{\varepsilon}_{kl}^{n+\frac{1}{2}}\\&=[\lambda\delta_{ij}\delta_{kl}+\mu(\delta_{ik}\delta_{jl}+\delta_{il}\delta_{jk})]\dot{\varepsilon}_{kl}^{n+\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

因此有

$$\overset{\triangledown}{\sigma}{}_{ij}^{n+\frac{1}{2}}=\left(\lambda+\frac{2}{3}\mu\right)\dot{\varepsilon}_{kk}^{n+\frac{1}{2}}\delta_{ij}+2\mu\left(\dot{\varepsilon}_{ij}-\frac{1}{3}\dot{\varepsilon}_{kk}\delta_{ij}\right) \tag{5-5-19}$$

记　$K=\lambda+\frac{2}{3}\mu, G=\mu, \varepsilon'_{ij}=\varepsilon_{ij}-\frac{1}{3}\varepsilon_{kk}\delta_{ij}$，则有

$$\overset{\triangledown}{\sigma}{}_{ij}^{n+\frac{1}{2}}=K\dot{\varepsilon}_{kk}^{n+\frac{1}{2}}\delta_{ij}+2G\dot{\varepsilon}'{}_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \tag{5-5-20}$$

（2）正交异性弹性　设应力与应变关系为

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{E} \tag{5-5-21}$$

其中 $\boldsymbol{S}$ 为应力矩阵，$\boldsymbol{E}$ 为应变矩阵，而

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{T}^T\boldsymbol{C}_l\boldsymbol{T} \tag{5-5-22}$$

式中 T 是坐标变换矩阵，C_l 是按正交材料主轴的材料常数定义的本构矩阵

$$
C_L^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_a} & -\frac{\nu_{ba}}{E_b} & -\frac{\nu_{ca}}{E_c} & 0 \\ -\frac{\nu_{ab}}{E_a} & \frac{1}{E_b} & -\frac{\nu_{cb}}{E_c} & 0 \\ -\frac{\nu_{ac}}{E_a} & -\frac{\nu_{bc}}{E_b} & -\frac{1}{E_c} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{ab}} \end{bmatrix} \tag{5-5-23}
$$

其中

$$
\frac{\nu_{ba}}{E_b} = \frac{\nu_{ab}}{E_a}, \quad \frac{\nu_{ac}}{E_a} = \frac{\nu_{ca}}{E_c}, \quad \frac{\nu_{bc}}{E_b} = \frac{\nu_{cb}}{E_c}.
$$

（3）随动硬化、各向同性硬化及其组合硬化弹塑性　这种弹塑性材料单向拉伸试验的应力应变关系如图 5-5-2 所示。输入数据为：弹性模量 E，泊松比 ν，初始屈服极限 σ_0，切线模量 E_T，硬化参数 $\beta(0\leqslant\beta\leqslant1)$，当 $\beta=0$ 时为随动硬化，$\beta=1$ 时为等向硬化，$0<\beta<1$ 为混合硬化。

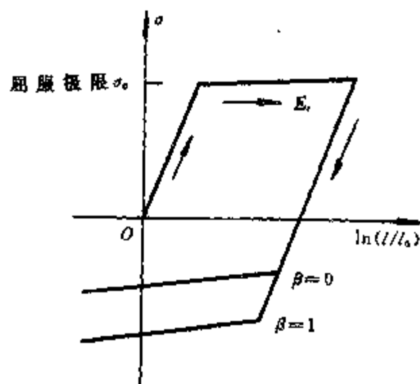


图 5-5-2　弹塑性材料单向拉伸试验的应力应变关系

依照连续介质力学的极分解定理，变形梯度张量 $F=\frac{\partial x}{\partial X}$（或 $F_{ij}=\frac{\partial x_i}{\partial X_j}$）可分解为

$$
F = RU
$$

式中 $R=FU^{-1}$ 为正交旋转张量，$U=(F^TF)^{\frac{1}{2}}$ 为对称正定张量，称为右伸长张量

采用 Green-Naghdi 应力率

$\overset{\triangledown}{\sigma}=\dot{\sigma}+\omega\sigma-\sigma\omega=R\dot{\sigma}R^T$

式中 $\omega=RR^T$ 为旋转率张量，σ 为柯西应力。

各向同性硬化材料塑性加载时屈服面中心固定不变而屈服面半径增大，随动硬化材料塑性加载时屈服面半径不变而屈服面中心沿塑性应变方向平移。而对于大多数实际材料，屈服的硬化规律介于各向同性硬化和随动硬化之间，称为混合硬化。

（4）热弹塑性材料

弹性

$$
\overset{\triangledown}{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}(\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_{kl}^T) + \dot{\theta}_{ij}dT \tag{5-5-24}
$$

式中，T 为温度

$$
\dot{\theta}_{ij} = \frac{dC_{ijkl}}{dT}C_{klmn}^{-1}\dot{\sigma}_{mn}
$$

$$
\dot{\varepsilon}_{ij}^T = \alpha\dot{T}\delta_{ij}
$$

$$C_{ijkl} = \begin{bmatrix} 1-\nu & & & & & \\ & 1-\nu & & & 0 & \\ & & 1-\nu & & & \\ & & & \frac{1-2\nu}{2} & & \\ 0 & & & & \frac{1-2\nu}{2} & \\ & & & & & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix}$$

塑性，屈服面函数

$$\phi = \frac{1}{2}S_{ij}S_{ij} - \frac{\sigma_y(T)^2}{3} \tag{5-5-25.1}$$

$$\sigma_y(T) = \sigma_o(T) + E_p(T)\varepsilon_{eff}^p \tag{5-5-25.2}$$

通过给定的一组$(T_n, E_n, \nu_n, \alpha_n, \sigma_{yn}, E_{Tn})$迭代求得数值解。

(5) 土壤和可压扁泡沫　屈服函数ϕ由J_2、P和常数a_0、a_1、a_2给出

$$\phi = J_2 - (a_0 + a_1P + a_2P^2) \tag{5-5-26}$$

其中$J_2 = \frac{1}{2}S_{ij}S_{ij}$　（屈服面上$J_2 = \frac{1}{3}\sigma_y^2$），其它步骤与材料(3)相同。

(6) 粘弹性材料　输入参数：体积模量E、短时间的剪切模量G_0、长时间的剪切模量G_∞和衰减系数β。

$$S_{ij} = 2\int_0^t \phi(t-\tau)\frac{\partial \dot{\varepsilon}_{ij}(\tau)}{\partial \tau}\mathrm{d}\tau \tag{5-5-27.1}$$

$$\phi(t) = G_\infty + (G_0 - G_\infty)\mathrm{e}^{-\beta t} \tag{5-5-27.2}$$

(7) 橡胶材料　输入参数：剪切模量G、泊松比$\nu=0.463$（缺省）

$$S_{ij} = G(V^{-1}C_{ij} - V^{-\frac{1}{1-2\nu}}\delta_{ij}) \tag{5-5-28.1}$$

$$C_{ij} = \frac{\partial x_k}{\partial a_i}\frac{\partial x_k}{\partial a_j} \tag{5-5-28.2}$$

(8) 高能炸药燃烧　输入参数：爆速D、$C-J$压力P_{C-J}与燃烧系数

$$F = \max(F_1, F_2) \tag{5-5-29}$$

其中

$$F_1 = \begin{cases} \dfrac{2(t-t_e)D}{3V_e/A_{emax}} & t > t_e \\ 0 & t \leqslant t_e \end{cases}$$

$$F_2 = \frac{1-V}{1-v_{CJ}}$$

t_e为爆轰波由起爆点传至当前单元形心处所需最短时间。若$F>1$，则设$F=1$。

(9) 空白材料　可通过此材料来避免计算应力、应变，如炸药爆轰。此处可输入一个截止压力，并可与状态方程联用。

(10) 弹塑性流体动力材料　屈服函数为

$$\phi = \frac{1}{2}S_{ij}S_{ij} - \frac{1}{3}\sigma_y^2 \leqslant 0 \tag{5-5-30}$$

其中

$$\sigma_y = \sigma_0 + f_n(\varepsilon_{eff}^p) + (a_1 + a_2 p)\max(o, p)$$

硬化函数

$$f_n(\varepsilon_{eff}^p) = E_p \varepsilon_{eff}^p$$

$$E_p = \frac{E_t E}{E - E_t}$$

$$\varepsilon_{eff}^p = \int_0^t \left(\frac{2}{3} \dot{\varepsilon}_{ij}^p \dot{\varepsilon}_{ij}^p \right)^{\frac{1}{2}} dt$$

(11) 与温度相关的弹塑性流体动力材料　此材料的剪切模量 G、屈服强度 σ_y，都随压力增长而增长，但随温度的升高而减少。在材料熔化前，定义剪切模量为

$$G = G_0 \left[1 + bpv^{\frac{1}{3}} - h\left(\frac{E - E_c}{3R'} - 300 \right) \right] e^{-\frac{fE}{(E_m - E)}} \tag{5-5-31}$$

其中 G_0、b、h、f 均为输入参数

$$E_c = \int_0^x \rho dx - \frac{900R' \exp(ax)}{(1 - x)^2 \left(r_o - a - \frac{1}{2} \right)} \tag{5-5-32}$$

为冷压缩能量，而

$$E_m = E_c(x) + 3R' T_m(x)$$

$$T_m(x) = \frac{T_{m0} \exp(2ax)}{v^2 \left(\nu_0 - a - \frac{1}{3} \right)}$$

$$X = 1 - u$$

$$R' = R\rho / A$$

其中 T_{mo} 为 $\rho = \rho_o$ 时的熔化温度，A 为原子量，R 为气体常数。定义屈服强度为：当 $E_m > E$ 时

$$\sigma_y = \sigma'_0 \left[1 + b' pv^{\frac{1}{3}} - h\left(\frac{E - E_c}{3R'} - 300 \right) \right] e^{-\frac{fE}{(E_m - E)}} \tag{5-5-33}$$

$$\sigma'_0 = \sigma_0 [1 + \beta(\gamma_i + \bar{\varepsilon}^p)]^n$$

其中 γ_i 是初始塑性应变，b' 和 σ'_0 为输入参数。当 $\sigma'_0 > \sigma_m$ 时，$\sigma'_0 = \sigma_m$。

在材料熔化后，σ_y 和 G 置为零。

八、状态方程模型

(1) 线性多项式

$$P = C_o + C_1\mu + C_2\mu^2 + C_3\mu^3 + (C_4 + C_5\mu + C_6\mu^2)E \tag{5-5-34}$$

其中　$\mu = \frac{1}{V} - 1$，C_o，C_1……C_6 为输入参数。

(2) JWL 高能炸药　此状态方程通常用于描述高能炸药及爆轰产物，其形式为

$$P = A\left(1 - \frac{\omega}{R_1 V}\right)e^{-R_1 V} + B\left(1 - \frac{\omega}{R_2 V}\right)e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V} \tag{5-5-35}$$

其中 A、B、R_1、R_2、ω 为输入参数。

(3) Sack Tuesday 高能炸药

$$P = \frac{A_3}{V^{A_1}} e^{-A_2 V}\left(1 - \frac{B_1}{V}\right) + \frac{B_2}{V} E \tag{5-5-36}$$

其中 A_1、A_2、A_3、B_1、B_2 为输入参数。

(4) Grüneisen 方程　定义压缩材料的压力为

$$P=\frac{\rho_0 C^2\mu[1+(1-\frac{\nu_0}{2})\mu-\frac{a}{2}\mu^2]}{[1-(S_1-1)\mu+S_2\frac{\mu^2}{\mu+1}-S_3\frac{\mu^3}{(\mu+1)^2}]^2}+(\gamma_o+a\mu)E \quad (5\text{-}5\text{-}37.1)$$

定义膨胀材料的压力为

$$P=\rho_o C^2\mu+(\gamma_o+a\mu)E \quad (5\text{-}5\text{-}37.2)$$

其中 C 为 u_s-u_p 曲线的截距，S_1、S_2、S_3 是 u_s-u_p 曲线斜率的系数，γ_o 是 Grüneisen gamma，a 是对 γ_o 的一阶体积修正。以上均为输入参数。

(5) 多项式比值

$$P=\frac{F_1+F_2E+F_3E^2+F_4E^3}{F_5+F_6E+F_7E^2}(1+\alpha\mu) \quad (5\text{-}5\text{-}38)$$

其中 $F_i=\sum_{j=0}^{n}A_{ij}\mu^j$，$\mu=\frac{\rho}{\rho_o}-1$，且 $i<3$ 时取 $n=4$，$i\geqslant3$ 时取 $n=3$。在膨胀区 F_1 用

$$F'_1=F_1+\beta\mu^2$$

代替。A_{ij}、α、β 为输入参数。

(6) 带能量吸收的线性多项式　输入参数同(1)，增加了一个能量吸收率的一个时间历程曲线。

(7) 高能炸药的起爆和反应过程　利用 JWL 状态方程，未反应炸药压力为

$$P_e=A_e(1-\frac{\omega_e}{R_{1e}v_e})e^{-R_{1e}v_e}+B_e(1-\frac{\omega_e}{R_{2e}v_e})e^{-R_{2e}v_e}+\frac{\omega E_e}{v_e} \quad (5\text{-}5\text{-}39)$$

同样，反应产物压力为

$$P_p=A_p(1-\frac{\omega_p}{R_{1p}v_p})e^{-R_{1p}v_p}+B_p(1-\frac{\omega_p}{R_{2p}v_p})e^{-R_{2p}v_p}+\frac{\omega E_p}{v_p} \quad (5\text{-}5\text{-}40)$$

未反应的炸药与反应产物的混合物用反应百分比来定义。假定压力和温度均处于平衡态，且体积可加

$$V=(1-F)V_e+FV_p$$

反应百分比为

$$\frac{\partial F}{\partial t}=I(F_{CRIT}-F)^y(\frac{1}{V_e}-1)^3[1+G(\frac{1}{V_e}-1)]+H(1-F)^yF^xP^z(\frac{1}{V_P}-1)^m \quad (5\text{-}5\text{-}41)$$

其中 I、G、H、x、y、z 和 m 为输入参数，通常 $m=0$。

(8) 列表式密集数据法

$$P=C(\varepsilon_r)+\gamma T(\varepsilon_r)E \quad (5\text{-}5\text{-}42)$$

此模型是内能线性的。ε_r 由相对体积的自然对数给出，卸载时按卸载体积模量至截止压力。

(9) 列表法　此法与(8)的唯一差别在于加载和卸载按同一曲线进行。

5.5.2 空间离散化

DYNA2D 采用四节点四边形平面应变单元和轴对称单元，DYNA3D 采用八节点六面体

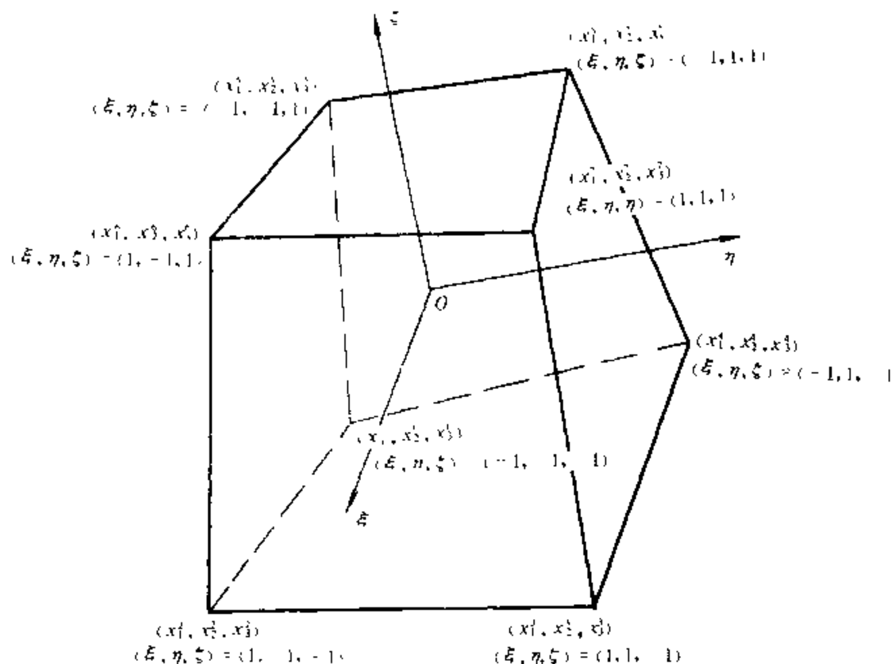


图 5-5-3　八节点六面体三维单元示意图

三维单元。以 DYNA3D 为例，如图 5-5-3 所示，单元内任一点的固定坐标可表示为

$$x_i(X_j,t)=x_i(X_j(\xi,\eta,\zeta),t)=\sum_{k=1}^{8}\phi_k(\xi,\eta,\zeta)x_i^k(t) \qquad (5\text{-}5\text{-}43)$$

其中形函数

$$\phi_k=\frac{1}{8}(1+\xi\xi_k)(1+\eta\eta_k)(1+\zeta\zeta_k)$$

自然坐标 ξ、η、ζ 在节点处取值为

$$(\xi_k,\eta_k,\zeta_k)=(\pm 1,\ \pm 1,\ \pm 1)$$

x_i^k 表示第 k 个节点在 i 方向的坐标。

设整个构形离散化为 N 个单元，由(5-5-13)式，近似地

$$\delta\Pi=\sum_{m=1}^{N}\delta\Pi_m=0$$

从而有

$$\sum_{m=1}^{N}\left\{\int_{V_m}\rho\ddot{x}_i\phi_i^m\mathrm{d}V+\int_{V_m}\sigma_{ij}^m\phi_{i,j}^m\mathrm{d}V-\int_{V_m}\rho f_i\phi_i^m\mathrm{d}V-\int_{S_1^m}t_i\phi_i^m\mathrm{d}S\right\}=0 \qquad (5\text{-}5\text{-}44)$$

式中 $\phi_i^m=(\phi_1,\phi_2,\cdots\cdots\phi_8)_i^m$，写成矩阵形式得到

$$\sum_{m=1}^{N}\left\{\int_{v_m}\rho N^T N\mathrm{d}V\boldsymbol{a}+\int_{v_m}\boldsymbol{B}^T\sigma\mathrm{d}V-\int_{v_m}\rho N^T\boldsymbol{b}\mathrm{d}V-\int_{S_1^m}N^T\boldsymbol{t}\mathrm{d}S\right\} \qquad (5\text{-}5\text{-}45)$$

其中，插值矩阵

$$N(\xi,\eta,\zeta)=\begin{bmatrix}\phi_1 & 0 & 0 & \phi_2 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & \phi_1 & 0 & 0 & \phi_2 & \cdots & \phi_8 & 0\\ 0 & 0 & \phi_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \phi_8\end{bmatrix}_{3\times 24} \qquad (5\text{-}5\text{-}46)$$

应力矢量

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zx})^T$$

$\underset{\sim}{B}$ 为 6×24 阶应变一位移矩阵

$$\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} \phi_{1,1} \\ \phi_{2,2} \\ \phi_{3,3} \\ \phi_{1,2} \\ \phi_{2,3} \\ \phi_{3,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \boldsymbol{N} \tag{5-5-47}$$

a 代表节点加速度

$$\begin{bmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \\ \ddot{x}_3 \end{bmatrix} = \boldsymbol{N} \begin{bmatrix} a_{x_1} \\ \vdots \\ a_{y_2} \\ \vdots \\ a_{y_8} \\ a_{z_8} \end{bmatrix} = \boldsymbol{N}\boldsymbol{a} \tag{5-5-48}$$

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} f_x \\ f_y \\ f_z \end{bmatrix}, \boldsymbol{t} = \begin{bmatrix} t_x \\ t_y \\ t_z \end{bmatrix} \tag{5-5-49}$$

将单元质量矩阵 $\boldsymbol{m} = \int_{V_m} \rho N^T N \mathrm{d}V$ 同一行上的元素合并到主对角线上，并由 $\sum_{m=1}^{8} \phi_m = 1$，得对角单元质量矩阵，其对角元素为

$$m_{kk} = \int_{v_m} \rho \phi_k (\sum_{n=1}^{8} \phi_n) \mathrm{d}V = \int_{v_m} \rho \phi_k \mathrm{d}V \tag{5-5-50}$$

此外，由变换关系

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_j}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial \zeta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \end{bmatrix} = J \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \end{bmatrix}$$

得到

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \end{bmatrix} = \boldsymbol{J}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_j}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \phi_j}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \tag{5-5-51}$$

5.5.3 高斯积分与沙漏问题

对于定义在体积 V 上函数 g 的积分，可采用高斯积分法求得

$$\int_V g \mathrm{d}V = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} g|\boldsymbol{J}|\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} g_{jkl}|\boldsymbol{J}|_{jkl} w_j w_k w_l \tag{5-5-52}$$

其中 $g_{jkl}=g(\xi_j,\eta_k,\zeta_l)$，$w_j$、$w_k$、$w_l$ 为权因子。

取 $n=1$，即为所谓单点高斯积分。此时

$$w_j = w_k = w_l = 2, \qquad \xi_j = \eta_k = \zeta_l = 0$$

得到

$$\int_V g \mathrm{d}V = 8g(0,0,0)|\boldsymbol{J}(0,0,0)|$$

这里 $8|\boldsymbol{J}(0,0,0)|$ 约等于单元的体积。

采用单点高斯积分，可以大大节省 CPU 时间，但可能出现零能模态(Zero Energe Mode)，亦即沙漏(Hourglassing)模式。

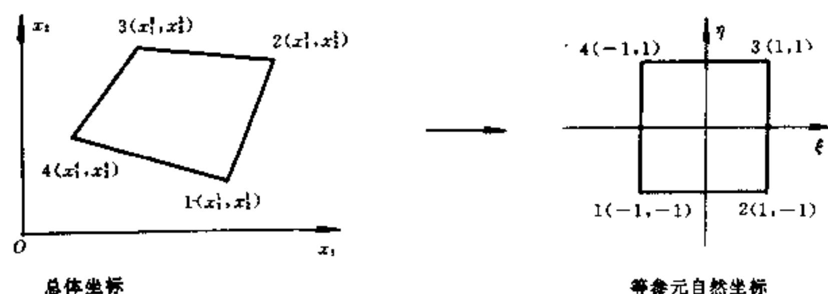


图 5-5-4 四节点四边形单元示意图

以四节点四边形单元为例，如图 5-5-4 所示，单元内任一点的速度 $\dot{x}_i(\xi,\eta,t)$ 可表示为

$$\dot{x}_i(\xi,\eta,t) = \sum_{k=1}^{4}\phi_k(\xi,\eta)\dot{x}_i^k(t) \tag{5-5-53}$$

式中形函数

$$\begin{aligned}\phi_k(\xi,\eta) &= \frac{1}{4}(1+\xi_k\xi)(1+\eta_k\eta) \\ &= \frac{1}{4}(1+\xi_k\xi+\eta_k\eta+\xi_k\eta_k\xi\eta), \quad (k=1,2,3,4)\end{aligned}$$

用 $\dot{x}_i^k(t)$ 表示第 k 个节点沿 x_i 轴方向的速度分量，则有

$$\dot{x}_i(\xi,\eta,t) = \frac{1}{4}(\Sigma^T + \xi\Lambda_1^T + \eta\Lambda_2^T + \xi\eta\Gamma^T)\begin{bmatrix}\dot{x}_i^1\\ \dot{x}_i^2\\ \dot{x}_i^3\\ \dot{x}_i^4\end{bmatrix} \tag{5-5-54}$$

其中

$$\Sigma = (1,1,1,1)^T$$
$$\Lambda_1 = (-1,1,1,-1)^T$$
$$\Lambda_2 = (-1,-1,1,1)^T$$
$$\Gamma = (1,-1,1,-1)^T$$

如图 5-5-5 所示，这四个矢量分别对应于刚体运动、拉应变、剪应变和弯曲四种变形模式。

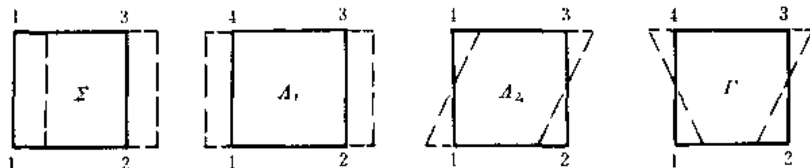


图 5-5-5　四个矢量对立的四种变形模式

在计算矩阵 B 及应变速率时，需要计算形函数在形心（$\xi=\eta=0$）处的导数 $\left\{\frac{\partial\varphi_k}{\partial x_1}\right\}_{\xi=\eta=0}$ 及 $\left\{\frac{\partial\varphi_k}{\partial x_2}\right\}_{\xi=\eta=0}$，而

$$\begin{bmatrix}\frac{\partial\phi_k}{\partial x_1}\\ \frac{\partial\phi_k}{\partial x_2}\end{bmatrix} = [J]^{-1}\begin{bmatrix}\frac{\partial\phi_k}{\partial\xi}\\ \frac{\partial\phi_k}{\partial\eta}\end{bmatrix}$$

在单元形心处，有

$$\frac{\partial\phi_k}{\partial\xi}\Big|_{\xi=\eta=0} = \frac{\partial}{\partial\xi}\left(\frac{1}{4}\Sigma_k + \frac{1}{4}\xi\Lambda_{1k} + \frac{1}{4}\eta\Lambda_{2k} + \frac{1}{4}\xi\eta\Gamma_k\right)\Big|_{\xi=\eta=0} = \frac{1}{4}\Lambda_{1k}$$

$$\frac{\partial\phi_k}{\partial\eta}\Big|_{\xi=\eta=0} = \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\frac{1}{4}\Sigma_k + \frac{1}{4}\xi\Lambda_{1k} + \frac{1}{4}\eta\Lambda_{2k} + \frac{1}{4}\xi\eta\Gamma_k\right)\Big|_{\xi=\eta=0} = \frac{1}{4}\Lambda_{2k}$$

其中，Σ_k、Λ_{1k}、Λ_{2k}、Γ_k 分别为矢量 Σ、Λ_1、Λ_2、Γ 的分量。

由此可见，采用单点高斯积分，$\xi\eta\Gamma_k$ 项不能发挥作用，相应的变形能被“丢失”了，其结果是产生数值振荡，使计算不能正常进行下去。为此 DYNA 程序引入沙漏粘性阻力，达到控制“沙漏”的目的。

设 Γ_{jk}（$j=1,2,3,4,k=1,2\cdots\cdots8$）为沙漏基矢

$$\Gamma_{jk} = \begin{bmatrix}1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1\\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1\\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1\\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1\end{bmatrix}_{4\times 8}$$

则沙漏粘性阻力为

$$f_{ik} = -a_h \sum_{j=1}^{4} h_{ij} \Gamma_{jk} \qquad (i = 1,2,3) \tag{5-5-55}$$

其中 $h_{kj} = \sum_{k=1}^{8} v_i^k \Gamma_{jk}$ 为沙漏模量，$a_h = Q_{hg} \rho V_e^{2/3} c/4$，$V_e$ 是单元体积，c 为材料声速，$Q_{hg} =$ 0.05～0.15是常系数，v_i^k 是第 k 个节点在 i 方向上的速度。

5.5.4 时间积分

方程(5-5-45)式可以写成

$$\boldsymbol{M a^n} = \boldsymbol{P^n} - \boldsymbol{F^n} + \boldsymbol{H^n} \tag{5-5-56}$$

其中 M 为对角质量矩阵，$\boldsymbol{P^n}$ 代表外力及体积力载荷，$\boldsymbol{F^n}$ 为应力散度矢量，$\boldsymbol{H^n}$ 是沙漏阻力。采用中心差分法求时间积分

$$\boldsymbol{a}^n = \boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{P}^n - \boldsymbol{F}^n + \boldsymbol{H}^n) \tag{5-5-57}$$

$$\boldsymbol{v}^{n+1/2} = \boldsymbol{v}^{n-1/2} + \boldsymbol{a}^n \Delta t^n \tag{5-5-58}$$

$$\boldsymbol{x}^{n-1} = \boldsymbol{x}^n + \boldsymbol{v}^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2} \tag{5-5-59}$$

$$\Delta t^{n+1/2} = (\Delta t^n + \Delta t^{n+1})/2 \tag{5-5-60}$$

其中，$\boldsymbol{v}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 分别代表节点速度与坐标矢量。

5.5.5 应力计算

应力计算按时间增量进行积分

$$\sigma_{ij}(t + dt) = \sigma_{ij}(t) + \dot{\sigma}_{ij} dt \tag{5-5-61}$$

若不考虑体积粘性对应力张量的影响，则有

$$\dot{\sigma}_{ij} = \overset{\nabla}{\sigma}_{ij} + \sigma_{ik}\Omega_{kj}\sigma_{jk}\Omega_{ki}$$

式中 $\Omega_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial v_i}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_j})$ 为旋转张量，$\overset{\nabla}{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}\dot{\varepsilon}_{kl}$ 为 Jaumann 应力率，C_{ijkl}是与应力相关的本构矩阵，$\dot{\varepsilon}_{ij}$是应变率张量

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)$$

对于 $\dot{\varepsilon}_{ij}$和 Ω_{ij}，利用应变-位移矩阵$\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \sum_{k=1}^{8} \frac{\partial \phi_k}{\partial x_j} v_i^k$ 在单元中心取值。应力的具体算式可写成

$$\sigma_{ij}^{n+1} = \sigma_{ij}^n + \gamma_{ij}^n + \overset{\nabla}{\sigma}_{ij}^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2} \tag{5-5-62}$$

其中

$$\overset{\nabla}{\sigma}_{ij}^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2} = C_{ijkl} \Delta \varepsilon_{kl}^{n+1/2}$$

$$\Delta \varepsilon_{ij}^{n+1/2} = \dot{\varepsilon}_{ij}^{n+1/2} \Delta t^{n+1/2}$$

$$\gamma_{ij}^n = (\sigma_{ip}^n \Omega_{pj}^{n+1/2} + \sigma_{jp}^n \Omega_{pi}^{n+1/2}) \Delta t^{n+1/2}$$

5.5.6 冲击波与人工体积粘性

撞击加载在结构内部产生冲击波，形成压力、密度、质点速度和能量的跳跃，这种间断条件给连续介质力学微分方程组的求解带来困难。

DYNA 程序采用 1955 年 Landshoff 改进的 Von Neuman-Richtmyer 人工粘性

$$q=\begin{cases}C_0\rho(\Delta x)^2\left(\dfrac{\partial\dot{x}}{\partial x}\right)^2-C_l\rho\Delta xa\dfrac{\partial\dot{x}}{\partial x} & \dfrac{\partial\dot{x}}{\partial x}<0\\ 0 & \dfrac{\partial\dot{x}}{\partial x}>0\end{cases}\tag{5-5-63}$$

其中 C_0、C_l 是无量纲常数，a 是局部声速。

将一维粘性推广到多维，一般都用应变率张量的迹 $\dot{\varepsilon}_{kk}$ 代替速度的散度 $\dfrac{\partial\dot{x}}{\partial x}$，用二维单元面积的平方根或三维单元体积的立方根代替特征长度 Δx。这里介绍二种 DYNA 程序的体积粘性。

1. 缺值粘性

$$q=\begin{cases}\rho l(C_0 l\dot{\varepsilon}_{kk}^2-C_l a\dot{\varepsilon}_{kk}) & \dot{\varepsilon}_{kk}<0\\ 0 & \dot{\varepsilon}_{kk}>0\end{cases}\tag{5-5-64}$$

式中 $l=\sqrt{A}$（二维）或 $l=\sqrt[3]{V}$（三维），缺省时 $C_0=1.5$，$C_l=0.06$。这种方法在单元长宽比过大时会造成异常 q 值。

2. Wilkins 粘性

$$q=\begin{cases}C_0\rho l^2\left(\dfrac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}\right)^2-C_l\rho a^*\dfrac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} & \dfrac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}<0\\ 0 & \dfrac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}>0\end{cases}\tag{5-5-65}$$

式中 l 为单元在加速度方向的厚度，$\mathrm{d}s/\mathrm{d}t$ 为加速度方向的应变率，a^* 为 $\sqrt{P/\rho}$（$P>0$ 时）。Wilkins 粘性可克服缺值粘性的缺点，但存储量及计算量都增加很多。

5.5.7 滑移界面

DYNA2D 可以处理四种类型的滑移线：

（1）只滑动；

（2）牵连滑动；

（3）有空隙的滑动；

（4）滑动、空隙和摩擦。

这四种类型的滑移线允许沿交界面任意分区，后两种类型还允许在初始构形中存在着空隙。滑移线可以相交，当空隙闭合时，仍满足动量守恒。

DYNA3D 支持三种滑移方式：只滑动、牵连滑动和有空隙滑动，并且对交界面的数目、类型及方向不加限制。

DYNA 程序的碰撞-接触算法主要有两种：①节点约束法；②对称罚函数法。

对于外力远大于屈服极限的高速碰撞问题，节点约束法所得结果较为理想，但计算量偏大。该方法的基本思想是：在每一个时间步修正构形之前，检查每一个没有与主表面接触的从节点是否在此时间步内贯穿主表面，若有从节点贯穿主表面，则将时间步长减小，以使所有的从节点均不贯穿主表面，且至多刚好到达主表面，在下一个时间步开始，对刚到达主表面的从节点施加碰撞条件。对所有与主表面接触的从节点都施加约束条件，以保持从节点与主表面接触。此外，检查与主表面接触的从节点单元是否存在受拉交界面力，如果存在，则用释放条件使从节点脱离主表面。

对称罚函数法的基本原理是每一时间步检查从节点是否穿透主表面，没有穿透则不作处理。如有穿透，则在该从节点与被穿透主表面之间引入一个较大的交界面接触力，其大小与穿透深度成正比，称为罚函数值，以此来限制节点对接触面的贯穿。罚函数值的大小受到稳定性考虑的限制。由于既对从节点进行上述罚函数处理，又对主节点进行罚函数处理，故称对称罚函数法。

下面简要说明从节点 N 的罚函数处理步骤：

（1）对任一从节点 N 找到与其最近的主节点 C（如图 5-5-6），$|NC|=\min(|NL|,|NC|,|NR|)$。

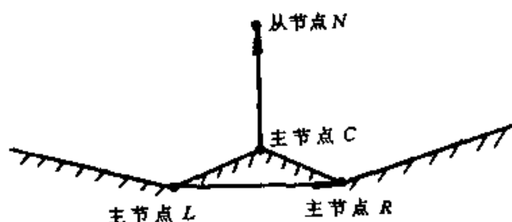


图 5-5-6 对称罚函数法的主、从节点

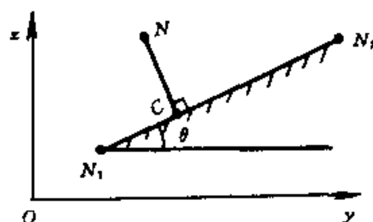


图 5-5-7 对称罚函数法中 C 点的确定

（2）确定从节点 N 可能接触的主段，若 $\overrightarrow{CN}\cdot\overrightarrow{LR}>0$，则 N 在 C 的右边，即可能与主段 CR 接触；若 $\overrightarrow{CN}\cdot\overrightarrow{LR}\leqslant 0$，则 N 在 C 的左边，即可能与主段 LC 接触。

（3）确定从节点 N 与主段 N_1N_2 可能接触的 C 点位置（见图 5-5-7）

用 C 点在主段 N_1N_2 上的比例系数 $A_o=\dfrac{\overline{N_1C}}{\overline{N_1N_2}}$ 和 $A_1=1-A_o$ 来表示。设 C 点为 N 在 N_1N_2 上的投影点，则

$$A_o=\frac{\overline{N_1C}}{\overline{N_1N_2}}=\frac{A_y\cos\theta+A_z\sin\theta}{\overline{N_1N_2}}$$

其中

$$A_y=y_N-y_{N1}$$
$$A_z=z_N-z_{N1}$$

（4）确定从节点 N 是否要贯穿主段 N_1N_2。由上图，$\overline{CN}=-A_y\sin\theta+A_Z\cos\theta$，若 $\overline{CN}>0$，则从节点 N 与主段 N_1N_2 不接触；若 $\overline{CN}\leqslant 0$，则从节点 N 与主段 N_1N_2 接触贯穿。

（5）若从节点 N 贯穿主段 N_1N_2，则计算主节点受的接触力，并组集到运动方程的右端项。

（6）若滑移线类型 $TYPE=4$，即考虑摩擦滑动，还要计算从节点 N 和主节点 N_1N_2 上的摩擦力。

（7）将上述从节点、主节点受的接触力组集到运动方程的右端项。

（8）对主节点重复上述步骤(1)～(7)。

对称罚函数与节点约束相比，程序编制简单，很少激起网格沙漏效应，这是由于这种算法具有对称性、动量守恒准确、不需要碰撞和释放条件，遇到相交滑动线无需特殊处理。对称罚函数的大小受到稳定性考虑的限制，若交界面压力过大，可能发生不可接受的穿透，需要加大罚函数或减小时间步长。

对于刚性墙，方法是类似的，区别有两点：一是只计算从节点（结构可能与刚性墙碰撞的节点），而不用计算刚性墙；二是当判断出从节点与刚性墙碰撞时，将从节点沿刚性墙法向的速度与加速度均置零。

5.5.8 网格重分

DYNA2D 具有网格重分功能。当网格严重扭曲时，需要进行网格重新划分，以保证网格能够继续进行。DYNA2D 通过人机对话方式，所有的单元和节点变量都可以变换到新的网格系统上。在重分区前后，计算并打印内能、动能、r/z 两个方向上的动量等参数，程序使用者可以借此判断重分区是否合适。DYNA2D 的网格重分，可以删除单元，但不能增加单元。

DYNA3D 目前尚不具有网格重分功能。

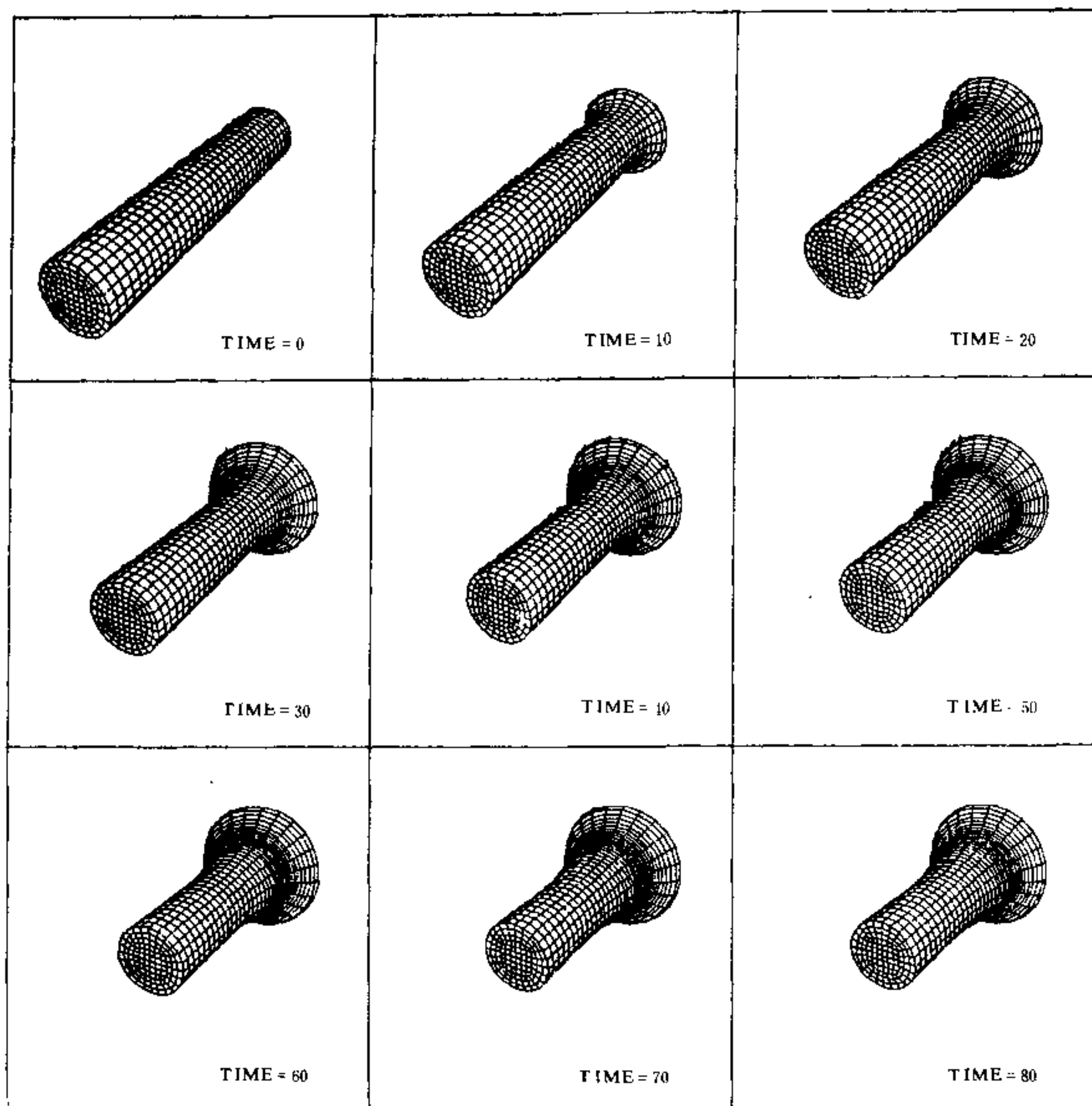


图 5-5-8 铜棒与刚性墙碰撞不同时刻构形（用 DYNA3D 计算）

5.5.9 初边值条件

DYNA2D 可以使用以下几种载荷函数：

(1) 几何相关的压力载荷；

(2) 几何相关的剪切力载荷；

(3) 由旋转产生的体积力载荷；

(4) 由基础加速度产生的体积力载荷；

(5) 集中节点载荷；

(6) 随动力；

(7) 节点速度-时间历程。历程数目不限，并可被其它载荷函数调用。

DYNA3D 的初边条件与 DYNA2D 相类似。

5.5.10 时间步长控制

根据稳定性条件，DYNA 程序取单元的极限时间步长为

$$\Delta t_e = 0.9V_e/\{[Q + (Q^2 + C^2)^{1/2}]A_{emax}\} \tag{5-5-66}$$

其中 $Q=Q_2c+Q_1V_e|\dot{\varepsilon}_{kk}|/A_{emax}$，$V_e$ 是单元体积，Ae_{max} 为单元最大边面积。得到时间步长为

$$\Delta t^{n+1} = \min\{\Delta t_1, \Delta t_2, \cdots\cdots, \Delta t_N\} \tag{5-5-67}$$

N 为单元总数。

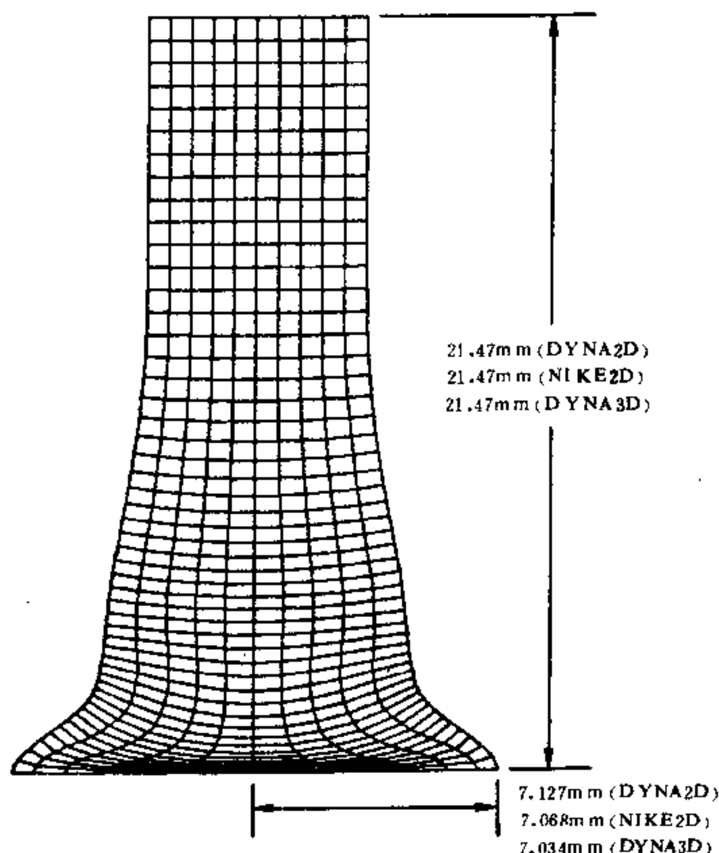


图 5-5-9 用三种程序计算 $t=80\mu s$ 时的构形

5.5.11 算例

(1) 铜棒半径 3.2mm，长 32.4mm，各向同性弹塑性材料，$E=117\text{GPa}$，$\upsilon=0.35$，$E_t=0.100\text{GPa}$，$\rho_o=8930\text{kg/m}^3$，$\sigma_o=0.40\text{GPa}$。以 $v_o=227\text{m/s}$ 的速度与刚性墙碰撞。用 DYNA3D 进行计算，各时刻构形如图 5-5-8 所示，为了比较，分别用 DYNA2D、NIKE2D 和 DYNA3D 进行计算，$t=80\mu\text{s}$ 时的构形如图 5-5-9 所示。

(2) 圆筒与钢轨之间的高速碰撞，$v_o=1676\text{cm/s}$，圆筒两端焊接两个 62.3Mdyne 的圆环，作为刚性质量考虑，圆筒中心与 3.8cm 宽钢轨碰撞。由于对称的结构和载荷，网格划分取结构的 1/4，圆筒长度为 30.5cm，外径为 22.9cm，壁厚为 0.635cm，用 DYNA3D 程序计算变形网格图如图 5-5-10 所示。

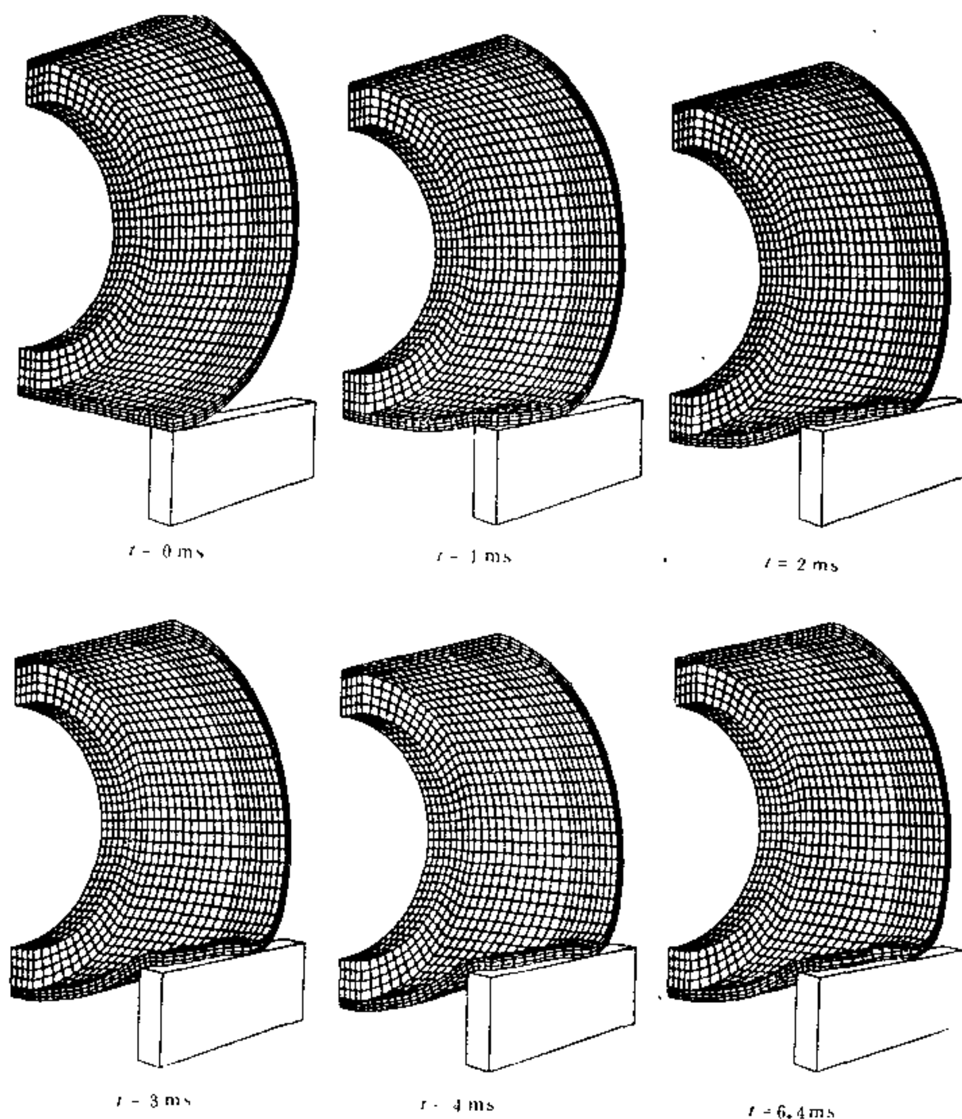


图 5-5-10 厚壁圆筒与钢轨的高速碰撞

(3) 为使航空炸弹与硬质地面碰撞不被立即破坏，在弹头上预制有缓冲槽。图 5-5-11 是用

DYNA3D 对这一问题进行的斜碰撞计算。

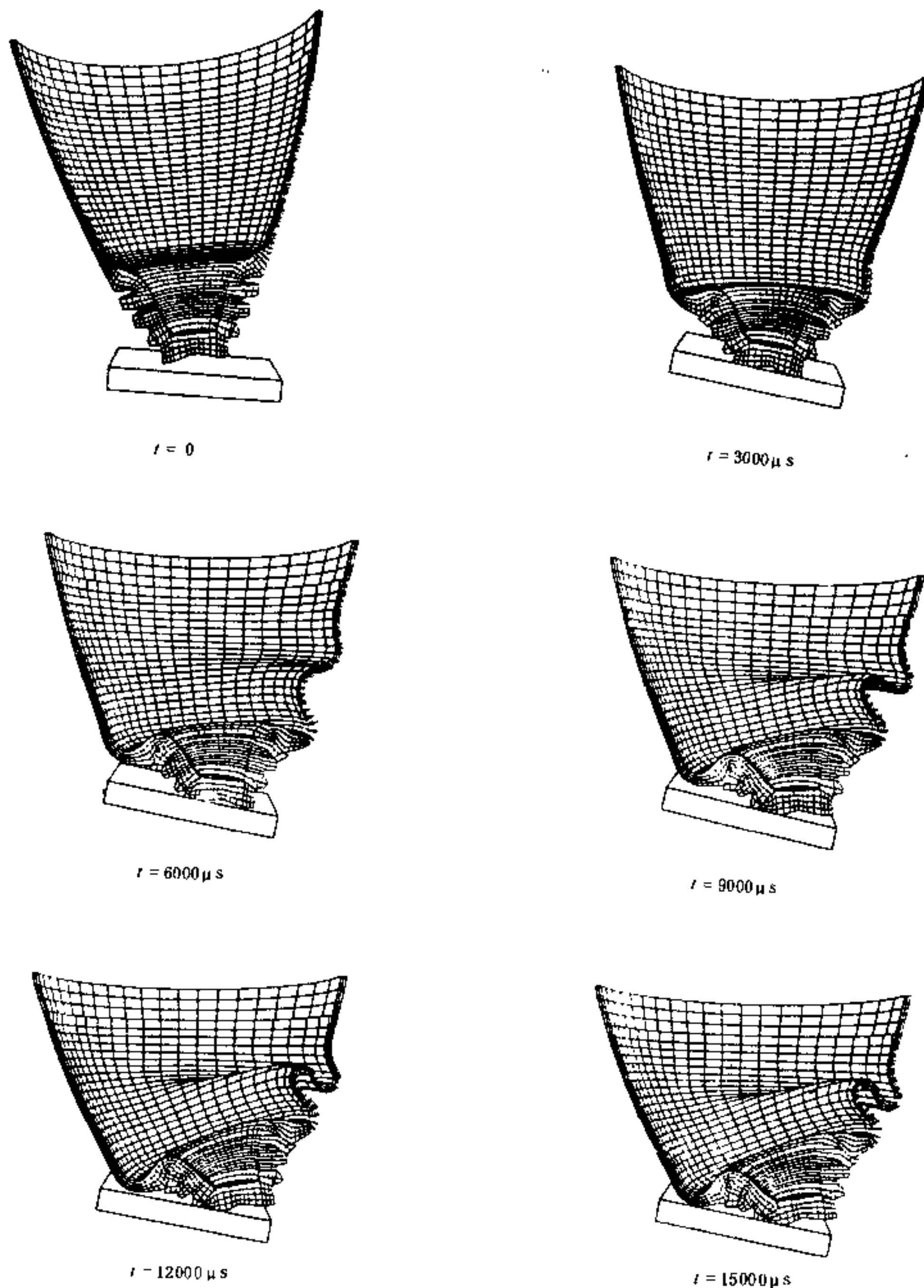


图 5-5-11 航弹与硬质地面的碰撞

(4) 使用自锻破片的反坦克地雷，引爆后药形罩形成自锻破片，可穿透坦克腹部装甲。如图 5-5-12 所示，DYNA3D 计算了自锻破片的形成过程。

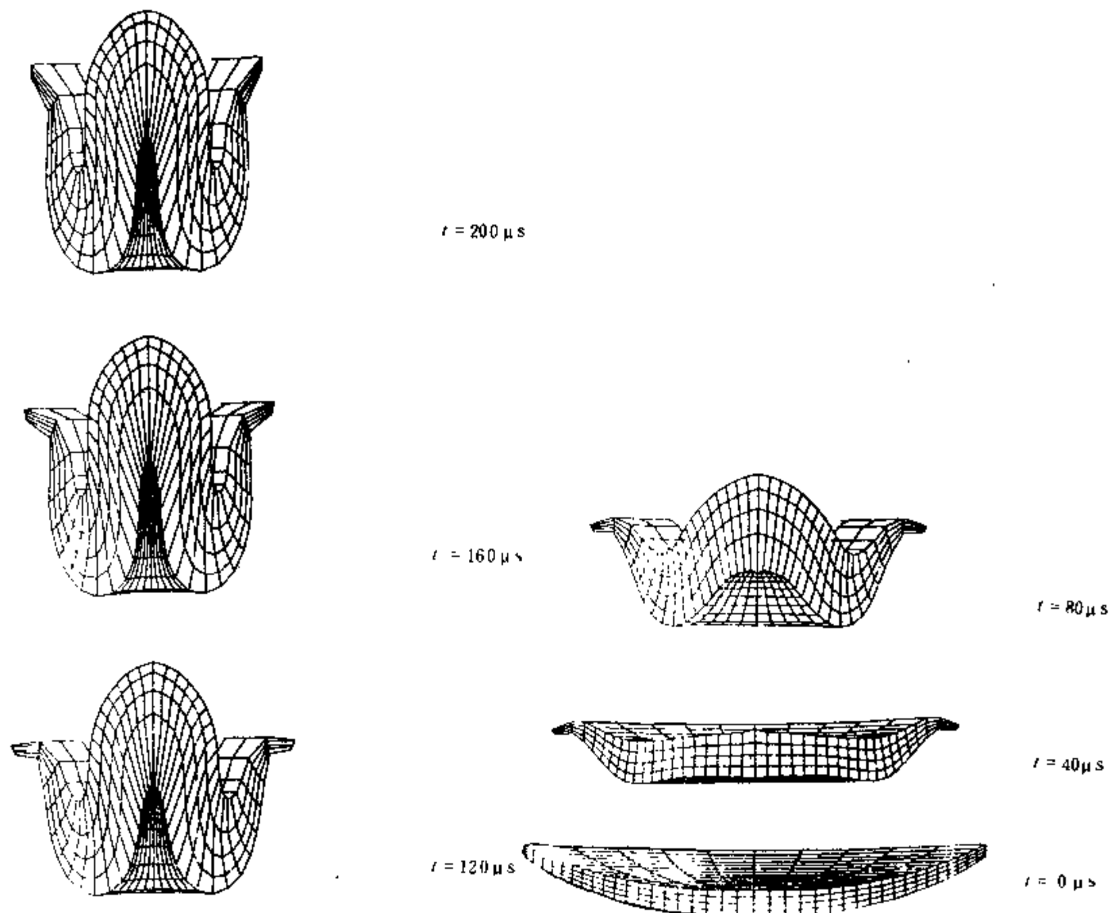


图 5-5-12 自锻破片的形成

参 考 资 料

〔1〕K.J. 巴特,E.L. 威尔逊,"有限元分析中的数值方法". 北京:科学出版社,1985.

〔2〕张允真,简明有限元法,辽宁科学技术出版社,1984.

〔3〕陈传森,有限元方法及其提高精度的分析. 湖南科学技术出版社,1982.

〔4〕李开泰,黄艾香,黄庆怀。"有限元方法及其应用",西安交通大学出版社,1984.

〔5〕Johnosn, G. R. EPIC—2, A Computer Program For Elastic—Plastic Impact Computations in Two Dimensions Plus Spin. Honeywell, Inc., Hopkins Minn. A Final Report For U. S. Army Ballistic Research Lab. 1977.

〔6〕Wang C. T. Applied Elasticity. Mc Graw—Hill New York, 1953.

〔7〕Flis, W., Miller. S., and Clark W. DEFEL: A Finite—Element Hydrodynamic Computer Code Dyna—East Corperation Technical Report DETR—84—05 1984.

〔8〕Wilkins M·L·. Calculation of Elastic—Plastic Flow. Univ of Calif., Lawrence Radiation Lab., Livermore, California UCRL—7322 April 1963.

〔9〕Kohn, B·J·. Compilation of Hugoniot Equation of State. Technical Report No.

AFWL—TR—69—38,1969.

〔10〕Johnson. G. R.. Analysis of Elastic—Plastic Impact Involving Severe Distortions. Journal of Applied Mechanics, ASME VoL. 98, Series E, 1976.

〔11〕破甲过程初步分析及一些基础知识,力学情报,No. 5. P36, 1973. 中国科学院力学研究所二室四组.

〔12〕FLis. W. J.. Advanced Algorithms For Computer Simulation of Hypervelocity Impact. Int. J. Impact Eng. Vol. 5, pp269—275, 1987.

〔13〕Pei Chi Chou, Deshou Liang, Longwu Wu, and William Flis. Mesh Rezoning For a Dynamic Triangular Finite—Element Hydrocode. Finite Element In Analysis and Design. 4(1988)175—192

〔14〕Stecher, F. P. and G. R. Johnson Lagrangian Computations For Projectile Penetration Into Thick Plate, 1984 ASME Int Computers in Engineering Conf. and Exhib., Las Vegas. NV,Aug. 12—16, 1984.

〔15〕DEFEL Users Manual. DYNA EAST CORPORATION Techuical Report 85—02 DYNA EAST CORPORATION,3201 Arch Street,Philadelphia PA 19104. May 1988

〔16〕Jonas A. Zukas, High Velocity Impact Dynamics.

〔17〕Hallquist J. O User's Manual for DYNA2D-An Explicit Two Dimensional Hydrodynamic Finite Element Code with Interactive Rezoning and Graphical Display. Lawrence Livermore National Laboratory. UCID—18756,Rev 3,February 1988

〔18〕Hallquist J. O. MAZE—An Input Generator for DYNA2D and NIKE2D Lawrence Livermore National Laboratory UCID—19029,April 1981.

〔19〕 Hallquist J. O. ORION:An Interactive Color Post—Processor for Two Dimensional Finite Element Codes. Lawrence. Livermore National Laboratory, UCID—19310, 1985.

〔20〕Hallquist. J. O. Theoretical Manual for DYNA3D Lawrence Livermore National Laboratory, UCID—19401,March 1983.

〔21〕Hallquist. J. O. DYNA3D User's Manual (Nonlinear Dynamic Analysis of Structures in Three Dimensions). Lawrence Livermore National Laboratory,UCID·19592,Rev. 5, May 1989.

〔22〕Brown B. E. and Hallquist J. O. TAURUS:An Interactive Post—Processor for the Analysis Codes NIKE3D,DYNA3D,TACO3D and GENINI Lawrence Livermore National Laboratory,UCID—19392,Rev. 1,1984.

第六章　有限差分方法的一些进展

由于爆炸现象中包含着大量丰富的流体流动现象，爆炸力学与流体力学密不可分，因而爆炸力学的数值计算方法的发展也在很大程度上取决于计算流体力学的发展。计算流体力学发展十分迅速，一方面得益于计算机科学的飞速发展，大容量、高速度计算机的出现，大大拓展了可以模拟的流动问题的范围；另一方面在于数值计算方法的改进，据估计，算法上的改进对于计算流体力学的贡献至少与由于计算机的发展而带来的益处相当。这种硬件与软件的发展，使得计算流体力学的内容大为丰富。对爆炸现象的数值模拟也是如此。

计算流体力学的近期发展可以简单地归结为它对所面临的以下几个主要问题的进一步研究：

(1) 间断的处理：包括激波、接触间断、物质界面、自由界面等的处理。

(2) 边界条件的处理，尤其是曲线边界的处理，即对复杂几何形状的处理。

(3) 数值计算的精度和效率。

(4) N-S 方程的求解及湍流模型的建立。

以上四个问题不是各自独立而是有机地耦合在一起的，尤其数值计算效率与精度问题与对其它三个问题的处理方法紧密相连，可以说是数值模拟的永恒的主题。在爆炸力学的数值模拟中，粘性流动较少考虑，采用 N-S 方程和湍流模型在目前还不现实，因此主要考虑前三个问题。爆炸现象的发生多是高速的，且经常是多介质的，并常伴随相变现象，流场中不可避免地出现激波、物质界面和相变区，因此对于强间断的处理一直是爆炸力学计算方法中关注的焦点。强间断处理方法的好坏，极大地影响着数值计算的效率和数值解的精度。对于复杂边界的处理同样是能否得到高精度数值解和提高计算效率的重要因素。本章将就有限差分方法中对该二问题的一些处理作简单介绍，重点放在最佳单调算法和网格生成技术上。

§6.1　引　言

在激波的处理方法中，根据对微分方程组的两种不同理解可以用两种不同的方法来处理。第一种方法是基于：即便出现有限间断，积分形式的守恒方程仍然成立，但由于采用偏微分形式的方程组时，在其成立的范围内将不允许间断发生，所以从经典的意义上说，它只能描述连续流动而不能描述间断。于是应采用积分形式的方程组导出间断关系式，间断被当成真正的不连续区，成为流动边界的一部分，这种方法就是数值计算中的激波装配法。另一种方法是基于分布函数理论，Lax[1]证明了守恒型差分格式的解，如果几乎处处收敛，则极限函数是弱解。弱解允许有限间断的存在。基于弱解理论，间断可以不再被当成边界，整个流动区域可以当成一个整体来求解，数值计算中的激波捕捉法即以此为基础[2]。在数值计算中引入数值粘性(人工粘性或格式粘性)，以使数值解在间断处光滑过渡。

激波捕捉法的应用要比激波装配法更为普遍，因为它一方而不必象装配法那样预估和跟踪激波，这对多维情形和具有复杂波系的流场是难于实现的。另一方面，在激波捕捉法中，由于采用统一的差分格式，可以对所采用的格式进行局部线性分析，估算方法的精度，掌握其稳定

性和收敛性条件，而对后者，非激波区的离散格式与激波区的代数关系式之间的迭代一般很难进行分析研究。

采用激波捕捉法捕获激波，一般是利用格式中的数值粘性或显式地引入人工粘性，这时存在着捕获激波的质量问题，即其位置误差、形状误差、强度误差及其对流场中其余部分的影响等问题，这是由于人工耗散或不合适的数值耗散、色散效应的引入导致了激波抹平以及寄生误差，这些误差往往引起激波上下游数值解的伪振荡。为了抑制这些误差，提出了多种高分辨率、高精度格式，及各种保持正值性的单调方法。大体上可以分为以下两个值得注意的方向：

其一是对差分格式的耗散、色散效应进行调节和控制，从而构造高分辨率、高精度格式。这里应用最为广泛的是 FCT(Flux Corrected Transport)技术和 TVD(Total Variation Diminishing)技术，许多高精度格式都采用了 FCT 技术，且其格式多是 TVD 的。本章将介绍这两个概念。

另一个方向是 Godunov 类型的方法，是从黎曼问题的高精度求解出发构造高分辨率、高精度格式，如 MUSCL(Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws)方法及更高精度的 PPM(Piecewise Parabolic Method)方法。本章也将作简单介绍。

对偏微分方程组定解问题的数值求解，一方面是通过各种离散方法如有限差分法、有限元法、谱方法等将偏微分方程组化为有限数目的代数方程或常微分方程，即对偏微分方程组本身的离散表达和简化处理，这无疑是数值计算的基础，是重要的方面，而另一方面，对于定解问题初、边值条件的离散表达也十分重要，如何处理复杂的流动边界是能否建立快速、高精度算法的关键课题之一。边界条件的表达取决于采用何种形式的坐标系和网格。网格的选取影响着整个问题的求解，对有限差分法更是关系重大。70 年代以来，网格生成技术以及网格对流动计算的影响的分析和如何设计最优的网格等问题日益令人注目，且发展迅速。为处理物面边界条件的贴体坐标生成技术，已可用于为复杂的三维求解域生成有利于计算的网格，为提高计算精度和效率的自适应网格方法的研究也发展很快。本章将就贴体坐标生成技术及自适应网格方法作些介绍。

§6.2 数值耗散与色散的调节与控制

对于具于有较大梯度的非定常可压缩流动问题的模拟，关键是应用保持正值性的非线性单调方法，因为象密度这种在原本意义上的正值量不应该在数值计算中变成无物理意义的负值量，FCT 是 D. L. Book，J. P. Boris[3~5]首先提出的一种保持正值性的差分构造技术，与 A. Harten[6]提出的 TVD 概念相结合，采用各种各样的 FCT 技术，形成了多种高分辨率、高精度格式，即最佳单调算法，它不容许由于缺乏数值分辨率而增加离散网格产生的非物理极值点。

6.2.1 通量修正输运方法——FCT

如上所述，FCT 是一种构造差分格式的方法而不是一种差分格式或某种算法。当待求解的物理问题涉及到强间断如激波阵面、接触间断面在空间的传播时，FCT 技术得到较优的解。经典的欧拉型方法在处理这类问题时，常常或者引入较大的数值耗散(一阶格式)，或者修正过头引入较大的数值色散(如 L－W 格式)，或需在间断区减小网格尺度从而减小了时间步长(稳定性要求)，或者需要对物理解的预先了解(激波装配法)。即是说，当必须处理强间断时，经

典的差分近似变得效率低下。

FCT 的基本想法是在色散型输运格式中引入修正的耗散项，使耗散被限制在由于色散可能导致非物理振荡的区域，这个修正的通量是非线性的，其大小通常依赖于物理量的当地值。FCT 的基本作法是在所有区域先引入足够的耗散，然后在无需耗散的区域引入相等的反耗散(antidiffusion)项从而抵消耗散，这是通过通量限制因子(flux limiter)做到的。即通过反耗散的引入达到调节、控制数值耗散与数值色散效应的目的。

以下考虑一维标量情形，多维矢量情形可用空间分裂法或交替方向法推广得到。对标量守恒方程

$$u_t + f(u)_x = 0 \qquad t > 0, x \in \boldsymbol{R} \tag{6-2-1.1}$$

$$u(x,0) = \phi(x) \qquad x \in \boldsymbol{R} \tag{6-2-1.2}$$

用显式 FCT 方法对上方程进行差分近似可以写成

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \lambda(f_{j+1/2}^T - f_{j-1/2}^T - f_{j+1/2}^D + f_{j-1/2}^D + f_{j+1/2}^A - f_{j-1/2}^A) \tag{6-2-2}$$

其中 $\lambda=\dfrac{\Delta t}{\Delta x}$，$f^T$ 是输运通量；f^D 是为保持稳定性和单调性引入的耗散通量；f^A 是反耗散通量，用来消除无需耗散的区域的耗散通量，它由限制因子控制以保持解的正值性：不产生新的极值点，已存在的极值点不再得到增强。显然差分式(6-2-2)是守恒型的。

对连续性方程

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0 \tag{6-2-3}$$

FCT 算法可看成包含三个差分算子：输运算子(T)、耗散算子(D)、反耗散算子(A)。前一个时间步的密度 ρ_j^n 被算子 T 作用得到输运值 ρ_j^T，接着由于耗散变成 ρ_j^{TD}，最后经通量修正得到下一个时间步的值 ρ_j^{n+1}，即

$$\rho_j^{n+1} = (1 + A)(1 + T + D)\rho_j^n \tag{6-2-4}$$

这是最先引入的 FCT 算法(SHASTA)[3]，由于采用这种方式在速度为零时不能消除耗散(即残余耗散)，Boris[4]提出了凤凰 FCT(Phoenical FCT)，可表示成

$$\rho_j^{n+1} = [(1 + A)(1 + T) + D]\rho_j^n \tag{6-2-5}$$

对于不同的输运算子和耗散算子，可以得到不同的 FCT 算法。

例 1 Phoenical FCT 对输运取 FTCS 格式

$$f_{j+1/2}^T = \frac{1}{2}(\rho_{j+1}^n + \rho_j^n)u$$

$$\rho_j^T = \rho_j^n - \frac{\sigma}{2}(\rho_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n) \tag{6-2-6}$$

$\sigma=\dfrac{u\Delta t}{\Delta x}$是库朗数，该格式不稳定，于是引入耗散

$$f_{j+1/2}^D = d(\rho_{j+1}^n - \rho_j^n)$$

$$\rho_j^{TD} = \rho_j^T + \nu(\rho_{j+1}^n - 2\rho_j^n + \rho_{j-1}^n) \tag{6-2-7}$$

d 是粘性系数，$\nu = d\lambda$ 是耗散系数。引入反耗散通量

$$f_{j+1/2}^A = a(\rho_{j+1}^T - \rho_j^T) \tag{6-2-8}$$

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{TD} - \mu(\rho_{j+1}^T - 2\rho_j^T + \rho_{j-1}^T) \tag{6-2-9}$$

其中 $\mu=a\lambda$ 是反扩散系数，a 是通量限制因子。(6-2-9)式是凤凰 FCT 的差分格式。

例 2 XDFCT[7] 为了消除残余耗散，Phoenical FCT 是在反耗散通量中用 ρ^T 代替 ρ^{TD}。

文献[7]中提出一个"两步法"，在半时间步仍用凤凰 FCT 法，在全时间步的反扩散通量(6-2-8)中用 $\rho^{n+1/2}$ 代替 ρ^T，得到 XDFCT 格式

$$\rho_j^{n+1/2} = \rho_j^n - \frac{\sigma}{4}(\rho_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n) + \nu(\rho_{j+1}^n - 2\rho_j^n + \rho_{j-1}^n) - \mu(\rho_{j+1}^T - 2\rho_j^T + \rho_{j-1}^T) \tag{6-2-10.1}$$

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n - \frac{\sigma}{2}(\rho_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n) + N(\rho_{j+1}^n - 2\rho_j^n + \rho_{j-1}^n) - M(\rho_{j+1}^{n+1/2} - 2\rho_j^{n+1/2} + \rho_{j-1}^{n+1/2}) \tag{6-2-10.2}$$

其中 $\rho_j^T = \rho_j^n - \frac{\sigma}{4}(\rho_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n)$

这里 N, M 是在全时间步上的耗散、反耗散系数。

误差分析表明：对格式(6-2-9)，取 $\nu = \frac{1}{6} + \frac{1}{3}\sigma^2, \mu = \frac{1}{6} - \frac{1}{6}\sigma^2$，则具有零残余耗散，且放大因子与相误差可达四阶，单调性要求 $|\varepsilon| \leqslant 1/2$。对 XDFCT 格式(6-2-10)，若进一步取 $N = \frac{1}{3} + \frac{1}{6}\sigma^2, M = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\sigma^2$，则可达同样效果，而单调性要求放宽到 $|\varepsilon| \leqslant 1$，这使得计算的时间步长可以增大一倍。

Book 和 Boris[4]引入强通量限制，若 $f_{j+1/2}^U$ 是未经限制的通量(uncorrect flux)

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{TD} - f_{j+1/2}^A + f_{j-1/2}^A \tag{6-2-11}$$

$$S = \mathrm{sgn}(f_{j+1/2}^U) \tag{6-2-12.1}$$

$$\Delta\rho_{j+1/2}^{TD} = \rho_{j+1}^{TD} - \rho_j^{TD} \tag{6-2-12.2}$$

$$f_{j+1/2}^A = S \cdot \max[0, \min(S\Delta\rho_{j-1/2}^{TD}, S\Delta\rho_{j+3/2}^{TD}, |f_{j+1/2}^U|)] \tag{6-2-12.3}$$

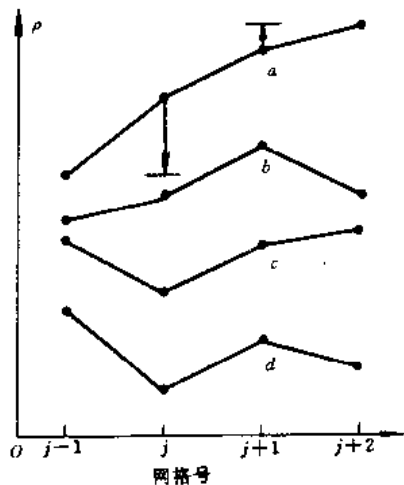


图 6-2-1 强限制通量($S=1$)示意图

(a) $\Delta\rho_{j-1/2}^{TD} > 0, \Delta\rho_{j+3/2}^{TD} > 0$；
(b) $\Delta\rho_{j-1/2}^{TD} > 0, \Delta\rho_{j+3/2}^{TD} \leqslant 0$；
(c) $\Delta\rho_{j-1/2}^{TD} \leqslant 0, \Delta\rho_{j+3/2}^{TD} > 0$；
(d) $\Delta\rho_{j-1/2}^{TD} \leqslant 0, \Delta\rho_{j+3/2}^{TD} \leqslant 0$；

上式所代表的通量限制可表示成如图 6-2-1($S=1$。当 $S=-1$ 时由镜面反射同样可得)。图中：(b)、(c)、(d)分别代表 $\Delta\rho_{j-1/2}^{TD}$、$\Delta\rho_{j+3/2}^{TD}$、$f_{j+1/2}^u$ 不同号的情形，此时 $f_{j+1/2}^A = 0$，以使现存极值不再得到增强；(a)表示三者同号($S=1$ 时全为正)的情形，此时通量限制是不产生新的极值点，引入的反耗散通量应不致使 j 与 $j+1$ 点的值超出水平线所示的位置。

由于引入反耗散通量或通量修正是在经过耗散作用之后进行的，强通量限制又需要保持单调性，在反耗散阶段不允许产生新的极值点，因此可能仍留下物理上不必要的较大的净耗散，从而产生"抹平"效应。

对强通量限制的一种修正是所谓的一侧通量修正。如果允许现存极值增强而抑制新极值点产生，则可能导致不稳定；但若只允许极大值产生或增强，压制极小值的产生或加强，则既可保持正值性又能保持稳定性，因为由于采用守恒型差分方程，对极小值采用强通量限制使得极大值的增强得到控制。一侧

通量限制可以写成

$$f^A_{j+1/2} = S \cdot \max[0, \min(S\Delta\rho^{TD}_{j'+1/2}, |f^u_{j+1/2}|] \tag{6-2-13}$$

其中 $j'=j-S$。用一侧通量限制，对波峰可以减轻"抹平"效应，对波谷仍存在"抹平"效应。若 ρ 是负值，则可采用允许极小值增长而压制极大值的原则，此时 $j'=j+S$；显然若 ρ 可正可负，则可采用所谓双单侧通量限制(double one-side flux limiting)：$j'=j-S\cdot\mathrm{sgn}(\rho_j)$。

采用单侧通量限制或双单侧通量限制求解非线性流体运动方程时，同样存在单侧的伪振荡。一般说来，FCT 方法用于求解对流占主导地位的方程较为有效，如反应方程。

采用强通量限制技术可以对现存的格式应用 FCT 技术。

例 3 Phoenical L-W。对 L-W 格式可进行如下的设计：

(1) 半时间步输运

$$\rho^{n+1/2}_{j+1/2} = \frac{1}{2}(\rho^n_j + \rho^n_{j+1}) - \frac{\lambda}{2}(\rho^n_{j+1}u^n_{j+1} - \rho^n_j u^n_j)$$

(2) 全时间步输运

$$\rho^T_j = \rho^n_j - \lambda(\rho^{n+1/2}_{j+1/2}u^{n+1/2}_{j+1/2} - \rho^{n+1/2}_{j-1/2}u^{n+1/2}_{j-1/2})$$

(3) 引入耗散通量

$$f^D_{j+1/2} = \eta(\rho^n_{j+1} - \rho^n_j)$$

$$\rho^{TD}_j = \rho^T_j + f^D_{j+1/2} - f^D_{j-1/2}$$

(4) 计算反耗散通量

$$f^U_{j+1/2} = \eta(\rho^T_{j+1} - \rho^T_j)$$

$$S = \mathrm{sgn}(f^U_{j+1/2})$$

$$\triangle\rho^{TD}_{j+1/2} = \rho^{TD}_{j+1} - \rho^{TD}_j$$

$$f^A_{j+1/2} = S \cdot \max[0, \min(S\Delta\rho^{TD}_{j-1/2}, S\Delta\rho^{TD}_{j+3/2}, |f^U_{j+1/2}|)]$$

(5) 引入通量限制

$$\rho^{n+1}_j = \rho^{TD}_j - f^A_{j+1/2} + f^A_{j-1/2}$$

例 4 Donor Cell FCT。贡献格格式或迎风格式是一阶格式，对于贡献格格式，可设计以下过程，其中引入了 $\eta_{j+1/2}$ 以达到二阶精度。

(1) 输运

$$\rho^T_j = \rho^n_j - \lambda(\rho^n_j u^n_j - \rho^n_{j-1}u^n_{j-1})$$

(2) 反耗散通量

$$\Delta\rho^T_{j+1/2} = \rho^T_{j+1} - \rho^T_j$$

$$\eta_{j+1/2} = \frac{1}{2}\sigma_{j+1/2}(1 - \sigma_{j+1/2})$$

$$\sigma_{j+1/2} = \lambda\max(u^n_j, u^n_{j+1})$$

$$f^A_{j+1/2} = S \cdot \max[0, \min(S\cdot\Delta\rho^T_{j-1/2}, S\triangle\rho^T_{j+3/2}, \eta_{j+\frac{1}{2}}|\Delta\rho^T_{j+1/2}|)]$$

$$S = \mathrm{sgn}(\Delta\rho^T_{j+1/2})$$

(3) 引入强通量限制

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^T - f^A_{j+1/2} + f^A_{j-1/2}$$

于是完成一个时间步。

图 6-2-2 给出了标准的检测问题(test problem):方波问题的计算结果。图中(a)给出了其初始状态,它是一个一维问题,对流速度是常数 $v=1.0$,密度最大为 2.0,最小为 0.5,波形如图所示。(b)、(c)分别给出了 800 个时间步后用贡献格格式(未经通量修正)和 Donor Cell FCT 格式的结果,可以看到明显的改善。图中还给出了平均误差 A.E.

$$A.E. = \frac{1}{100}\sum_{j=1}^{100}|\rho_j^n - \rho_j(n\Delta t)|$$

其中 100 指网格点数目,$\rho_j(n\Delta t)$为准确解的值。可以看出,由于采用了 FCT 技术,其平均误差 $A.E.=0.064$ 降为不采用 FCT 技术平均误差 $A.E.=0.26$ 的四分之一。

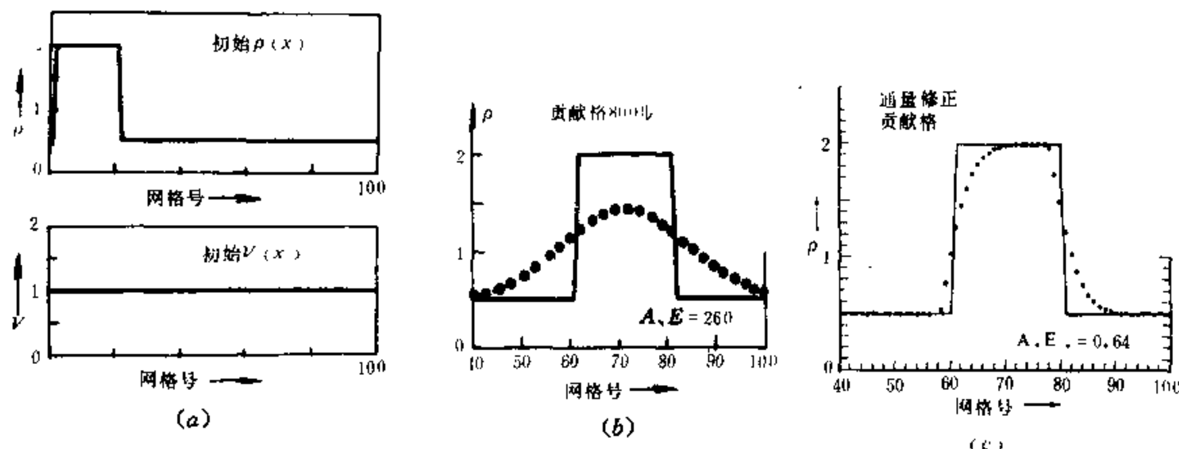


图 6-2-2 贡献格格式与 Donor Cell FCT 的比较

(a)标准方波问题初始条件; (b)贡献格格式的结果; (c)Donor Cell FCT 的结果

6.2.2 总变差减小——TVD

TVD 格式是近年来提出的最为引人入胜的概念之一。TVD 要求发展这样一类格式,其在非线性标量情形及常系数系统下是总变差减小的,它希望解决存在于经典的激波捕捉法差分格式中的困难:虽然在弱解满足熵不等式时,单调守恒差分格式的解收敛到(6-2-1)式的物理解,但单调格式仅是一阶的,因而在解变化剧烈的时空域导致粗糙的近似(激波抹平);而当使用在线性理论指导下发展起来的经典的高阶格式时,虽然可以在格式中引入较大的耗散项来压制数值解的伪振荡,但这样做同样将抹平间断、降低精度。

考虑标量守恒律初值问题(6-2-1)式,定义 $u(x,t)$的总变差为

$$TV(u) = \sum_j |\Delta u_{j+1/2}| \tag{6-2-14}$$

其中 $\Delta u_{j+1/2}=u_{j+1}-u_j$,即总变差是函数值上升与下降的增量的总和,是函数值摆动的一种量度。

可以证明，对单个守恒律方程的初值问题(6-2-1)式，若初值$\phi(x)$有有界的总变差，其解具有总变差减小的性质

$$TV(u(t_2)) \leqslant TV(u(t_1)), t_2 > t_1 \tag{6-2-15}$$

这正是单调性的要求。

(6-2-1)式的$(2k+1)$点的显式守恒型差分格式可以写成

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= H(u_{j-k}^n, u_{j-k+1}^n, \cdots, u_{j+k}^n) \\ &= u_j^n - \lambda(\bar{f}_{j+1/2}^n - \bar{f}_{j-1/2}^n) \end{aligned} \tag{6-2-16}$$

其中$\bar{f}$为数值通量

$$\bar{f}_{j+1/2}^n = \bar{f}(u_{j-k+1}^n, \cdots, u_{j+k}^n) \tag{6-2-17}$$

满足足相容性条件

$$\bar{f}(u, \cdots, u) = f(u) \tag{6-2-18}$$

(6-2-16)式也可以写成算子形式

$$u^{n+1} = L \cdot u^n \tag{6-2-16'}$$

若H是其$(2k+1)$个自变量的单调不减函数，则称格式(6-2-16)式是单调格式(monotone scheme)；若差分算子L是保单调的(即若u_j^n是j的单调函数，则$u_j^{n+1}=Lu_j^n$也是j的单调函数，且具有同样的单调性)，则称差分格式(6-2-16)式为保单调格式(monotonicity preserving)。

Harten[6]证明了：

(1) 单调格式是 TVD 的；

(2) TVD 格式是保单调格式。

对于线性格式

$$u_j^{n+1} = \sum_{l=-k}^{k} C_l u_{j+l}^n \tag{6-2-19}$$

其中C_l与$u_{j+l}^n, l=-k,\cdots,k$无关，(6-2-19)式是保单调格式的充要条件是$C_l \geqslant 0, -k \leqslant l \leqslant k$。所以，对于线性差分格式，保单调格式就是单调格式。从而线性 TVD 格式是单调格式，进而可知线性 TVD 格式是一阶格式。为了得到高分辨率的 TVD 格式，必须考虑非线性差分格式。

一般地，一阶格式是三点格式，二阶格式是五点格式，它们都可表示成以下形式

$$(L \cdot u)_j^n = u_j^n + C_{j+1/2}^+ \Delta u_{j+1/2}^n - C_{j-1/2}^- \Delta u_{j-1/2}^n \tag{6-2-20.1}$$

$$C_{j+1/2}^+ = C^+(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n, u_{j+2}^n) \tag{6-2-20.2}$$

$$C_{j-1/2}^- = C^-(u_{j-2}^n, u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n) \tag{6-2-20.3}$$

Hartem[6]给出了上述格式是 TVD 格式的一个充分条件：

$$C_{j+1/2}^{\pm} \geqslant 0 \tag{6-2-21.1}$$

$$C_{j+1/2}^+ + C_{j+1/2}^- \leqslant 1 \tag{6-2-21.2}$$

证明：由(6-2-20.1)式易得

$$\begin{aligned} \Delta u_{j+1/2}^{n+1} &= u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1} = (L \cdot u)_{j+1}^n - (L \cdot u)_j^n \\ &= C_{j-1/2}^- \Delta u_{j-1/2}^n + (1 - C_{j+1/2}^- - C_{j+1/2}^+) \Delta u_{j+1/2}^n + C_{j+3/2}^+ \Delta u_{j+3/2}^n \end{aligned}$$

由(6-2-21)式

$$|\Delta u_{j+1/2}^{n+1}| \leqslant (1 - C_{j+1/2}^{-} - C_{j-1/2}^{-})|\Delta u_{j+1/2}^{n}| + C_{j-1/2}^{-}|\Delta u_{j-1/2}^{n}| + C_{j+3/2}^{+}|\Delta u_{j+3/2}^{n}|$$

因此

$$TV(u(n+1)\Delta t)) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\Delta u_{j+1/2}^{n+1}|$$

$$\leqslant \sum_{j=-\infty}^{\infty} (1 - C_{j+1/2}^{-} - C_{j+1/2}^{+})|\Delta u_{j+1/2}^{n}| + \sum_{j=-\infty}^{\infty} C_{j+1/2}^{-}|\Delta u_{j-1/2}^{n}$$

$$+ \sum_{j=-\infty}^{\infty} C_{j+3/2}^{-}|\Delta u_{j+3/2}^{n}| = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\Delta u_{j+1/2}^{n}| = TV(u(n\Delta t))$$

所以(6-2-20)式是 TVD 的。

在构造差分格式时常常用到修改方程(modified equation)的概念。C. W. Hirt[8]的启示性稳定性理论指出，对于稳定的(6-2-1)式的差分格式，其等价的修改方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{p=0}^{\infty} \mu_{2p+1} \frac{\partial^{2p+1} u}{\partial x^{2p+1}} + \sum_{p=1}^{\infty} \mu_{2p} \frac{\partial^{2p} u}{\partial x^{2p}} \tag{6-2-22}$$

其中

$$\mu_1 = -a(u) = -\frac{df(u)}{du} \tag{6-2-23}$$

(6-2-22) 式中的$\sum_{p=1}^{\infty} \mu_{2p} \frac{\partial^{p} u}{\partial x^{2p}}$ 最低阶项系数 μ_{2r} 应满足

$$(-1)^r \mu_{2r} < o \tag{6-2-24}$$

若差分方程是一阶精度的，则其等价的修改方程在略去高阶项后可写成

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = \varepsilon[\beta(u)u_x]_x \tag{6-2-25}$$

$\varepsilon>0$ 时，差分方程稳定的必要条件是 $\beta(u)>0$。$\varepsilon[\beta(u)u_x]_x$ 即是数值粘性项。以此构造差分方程时，对应的项是格式粘性。

对一阶守恒型差分方程(6-2-16)式，文献[6]给出等价的修改方程

$$u_t + f(u)_x = \Delta t[\beta(u,\lambda)u_x]_x \tag{6-2-26. 1}$$

$$\beta(u,\lambda) = \frac{1}{2\lambda^2}\left[\sum_{l=-k}^{k} l^2 H_l(u,u,\cdots,u) - \lambda^2 a^2(u)\right] \tag{6-2-26. 2}$$

$$H_l(u,u,\cdots,u) = \frac{\partial H(W_{-k},W_{-k+1},\cdots,W_k)}{\partial W_l}\bigg|_{(u,u,\cdots,u)} \tag{6-2-26. 3}$$

对单调格式 $\beta(u,\lambda)>0$。单调差分格式逼近(6-2-1)式时具有一阶精度，但逼近抛物型修改方程(6-2-26)式时具有二阶精度，可据此构造高分辨率的 TVD 格式。

6.2.3 Harten 的构造[6]

如上所述，用一阶格式逼近修改方程(6-2-26)式可达二阶精度，记

$$g(u,\Delta x) = \Delta x \cdot \lambda^2 \cdot \beta(u,\lambda)u_x, \tag{6-2-27}$$

则(6-2-26. 1)式成为

$$u_t + [f(u) - \frac{1}{\lambda}g(u,\Delta x)]_x = o \tag{6-2-28}$$

将该一阶格式应用于以下的修改方程

$$u_t + [f(u) + \frac{1}{\lambda}g(u,\Delta x)]_x = 0 \tag{6-2-29}$$

时，仍可得二阶精度。*Harten* 据此将三点一阶格式构造成五点二阶格式。

对(6-2-1)式，三点格式的通量可一般地写成

$$\bar{f}_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left[f_j + f_{j+1} - \frac{1}{\lambda}Q(\lambda a_{j+1/2})\Delta u_{j+1/2}\right] \tag{6-2-30. 1}$$

$$a_{j+1/2} = \begin{cases} \Delta f_{j+1/2}/\Delta u_{j+1/2} & \Delta u_{j+1/2} \neq 0 \\ a(u_j) & \Delta u_{j+1/2} = 0 \end{cases} \tag{6-2-30. 2}$$

Q 代表粘性系数，$\lambda = \Delta t/\Delta x$。由 TVD 格式的充分条件可以验证 $Q(x)$ 满足

$$|x| \leqslant Q(x) \leqslant 1 \qquad \text{当 } 0 \leqslant |x| \leqslant \mu \leqslant 1 \tag{6-2-31. 1}$$

且库朗条件

$$\lambda \max_j |a_{j+1/2}| \leqslant \mu \tag{6-2-31/2}$$

满足时，(6-2-30)式是 TVD 的。

Q 取不同形式可得到不同的差分格式，如：

(1) 取 $Q(x) = x^2$ 得 L-W 格式

$$\bar{f}_{j+1/2} = \frac{1}{2}[f_j + f_{j+1} - \lambda(a_{j+1/2})^2\Delta u_{j+1/2}]$$

(2) 取 $Q(x) = 1$，则得 Lax-Friendrichs 格式

$$\bar{f}_{j+1/2} = \frac{1}{2}[f_j + f_{j+1} - \frac{1}{\lambda}\Delta u_{j+1/2}]$$

(3) 取 $Q(x) = |x|$，则得 CIR(Courant－Isaacson－Rees)格式

$$\bar{f}_{j+1/2} = \frac{1}{2}[f_j + f_{j+1} - |a_{j+1/2}|\Delta u_{j+1/2}|]$$

由(6-2-31)式易知：L-W 格式不是 TVD 格式，L-F、CIR 格式是 TVD 格式，且 L-F 格式还满足熵不等式。

通过直接计算可知，格式(6-2-30)式有

$$\beta(u,\lambda) = \frac{1}{2\lambda^2}[Q(\nu) - \nu^2], \nu = \lambda a(u) \tag{6-2-32. 1}$$

$$g(u,\lambda,\Delta x) = \frac{\Delta x}{2}[Q(\nu) - \nu^2]u_x \tag{6-2-32. 2}$$

于是，为得到五点二阶格式，引入修正通量

$$\bar{f}^M_{j+1/2} = \frac{1}{2}[f_j + f_{j+1}] + \frac{1}{2\lambda}[g_j + g_{j+1} - Q(\nu_{j+1/2} + \gamma_{j+1/2})\Delta u_{j+1/2}] \tag{6-2-33. 1}$$

$$\gamma_{j+1/2} = \begin{cases} \Delta g_{j+1/2}/\Delta u_{j+1/2} & \Delta u_{j+1/2} \neq 0 \\ 0 & \Delta u_{j+1/2} = 0 \end{cases} \tag{6-2-33. 2}$$

$$\nu_{j+1/2} = \lambda a_{j+1/2} \tag{6-2-33. 3}$$

对 $g_j = g(u_{j-1}, u_j, u_{j+1})$ 的要求是

(1) g 应保证(6-2-33)式的差分格式是 TVD 的；

(2) g 应使 γ 有界；

(3) 应使该格式具二阶精度。

由(6-2-33)式的各式可知,在极值点,由于 $\Delta u_{j+1/2}=0$,(6-2-33)式只能达到一阶精度,这是 TVD 格式的特性。

Harten 给出

$$g_j = S_{j+1/2}\max[0,\min(|\tilde{g}_{j+1/2}|,S_{j+1/2}\cdot\tilde{g}_{j-1/2})] \tag{6-2-34.1}$$

$$\tilde{g}_{j+1/2} = \frac{1}{2}[Q(\nu_{j+1/2}) - (\nu_{j+1/2})^2]\Delta u_{j+1/2} \tag{6-2-34.2}$$

$$S_{j+1/2} = \mathrm{sgn}(\tilde{g}_{j+1/2}) \tag{6-2-34.3}$$

文献[6]证明以上给出的 g_j 能得到二阶 TVD 格式。

对 $Q(x)$ 选取应使导出的格式满足熵条件,由(6-2-31)式很自然地取 $Q(x)=|x|$,但考虑到 $x=0$ 时,$\beta(u,\lambda)=0$,数值粘性消失,为避免这种情况,文献[6]中取

$$Q(x)=\begin{cases}|x| & |x|\leqslant\varepsilon\\ \dfrac{1}{2}(\dfrac{x^2}{\varepsilon}+\varepsilon) & |x|<\varepsilon\end{cases} \tag{6-2-35}$$

一般取 $0.05\leqslant\varepsilon\leqslant0.5$。

对于常系数线性系统,可以黎曼利用特征值的存在性化成标准型,而对每一个黎曼不变量单独处理。

TVD 概念对非线性标量情形或常系数情形有明确定义,但对于非线性双曲型方程组,准确解并不具有总变差随时间递减的性质。实际上在波相互作用的区域,变差可能会有所上升。因此,对非线性方程组,其差分格式是否一定是 TVD 的,仍然没有定论。

在实际应用中,把 TVD 概念应用于"局部冻结"(locally frozen)的常系数系统。利用维数分裂法推广到多维情形。

可以看出,由于 TVD 格式应用于一般的双曲型系统时,要在局部冻结的常系数情形求解特征值问题,对于复杂的状态方程,就比较难于处理。对于多方气体这类简单的状态方程,则很容易给出其特征问题的表达式。

利用以上简述的过程,对于二维(平面 $\sigma=0$,轴对称 $\sigma=1$)非定常可压缩无粘流动

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{w})}{\partial r}+\frac{\partial \boldsymbol{g}(\boldsymbol{w})}{\partial z}=\boldsymbol{h}(\boldsymbol{w},r)$$

其中 $\boldsymbol{w}=(\rho,\rho u,\rho v,\rho E)^T$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{w})=(\rho u,P+\rho u^2,\rho uv,\rho u(E+\frac{P}{\rho}))^T$$

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{w})=(\rho v,\rho uv,P+\rho v^2,\rho v(E+\frac{P}{\rho}))^T$$

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{w},r)=(-(\frac{\rho u}{r})^\sigma,-(\frac{\rho u^2}{r})^\sigma,-(\frac{\rho uv}{r})^\sigma,-[\frac{\rho u(E+\frac{P}{\rho})}{r}]^\sigma)^T$$

ρ、P、E 分别是密度、压力、比总能,u、v 是 r、z 方向速度分量,若 e 是比内能,对多方气体

$$P=(k-1)\rho e$$

可以给出以下的分裂格式

$$w_{i,j}^{n+1}=L_zL_rw_{i,j}^n+2\Delta t h(w_{i,j}^n,r_i)$$

$$w_{i,j}^{n+2}=L_rL_zw_{i,j}^{n+1}+2\Delta t[h(w_{i,j}^{n+1},r_i)-h(w_{i,j}^{n},r_i)]$$

$$L_rw_{i,j}=w_{i,j}-\frac{\Delta t}{\Delta r}(\bar{f}_{i+1/2,j}-\bar{f}_{i-1/2,j})$$

$$L_zw_{i,j}=w_{i,j}-\frac{\Delta t}{\Delta z}(\bar{g}_{i,j+1/2,}-\bar{g}_{i,j-1/2})$$

时间步长

$$\Delta t^n=\mu\min\left(\frac{\Delta r}{\max\limits_{i,j}(|u_{i,j}^n|+C_{i,j}^n)},\frac{\triangle z}{\max\limits_{i,j}(|v_{i,j}^n|+C_{i,j}^n)}\right)$$

$C_{i,j}$是音速，μ 是库朗数，而

$$t^{n+2}=t^n+2\Delta t^n$$

$$\bar{f}_{i+1/2,j}=\frac{1}{2}\left[f_{i,j}+f_{i+1,j}+\frac{\Delta r}{\Delta t}\sum_{k=1}^{4}\beta_{i+1/2,j}^kR_{i+1/2,j}^k\right]$$

$$\beta_{i+1/2,j}^k=\theta_{i+1/2,j}^k(\xi_{i,j}^k+\xi_{i+1,j}^k)-Q(\gamma_{i+1/2,j}^k+\theta_{i+1/2,j}^k\eta_{i+1/2,j}^k)\alpha_{i+1/2,j}^k$$

$$\eta_{i+1/2,j}^k=\begin{cases}\Delta\xi_{i+1/2,j}^k/\alpha_{i+1/2,j}^k & \alpha_{i+1/2,j}^k\neq 0\\ 0 & \alpha_{i+1/2,j}^k=0\end{cases}$$

$$\alpha_{i+\frac{1}{2},j}^k=L_{i+\frac{1}{2},j}^k(w_{i+1,j}-w_{i,j})$$

$$\xi_{i,j}^k=S_{i+1/2,j}^k\max[0,\min(|\tilde{\xi}_{i+1/2,j}^k|),S_{i+1/2,j}^k\tilde{\xi}_{i-1/2,j}^k]$$

$$\tilde{\xi}_{i+1/2,j}^k=\frac{1}{2}[Q(\gamma_{i+1/2,j}^k)-(\gamma_{i+1/2,j}^k)^2]\alpha_{i+1/2,j}^k$$

$$S_{i+1/2,j}^k=\mathrm{sgn}(\tilde{\xi}_{i+1/2,j}^k)$$

$$\gamma_{i+1/2,j}^k=\frac{\Delta t}{\Delta r}a_{i+1/2,j}^k$$

$$\theta_{i,j}=\begin{cases}\dfrac{|\alpha_{i+1/2,j}^k-\alpha_{i-1/2,j}^k|}{|\alpha_{i+1/2,j}^k|+|\alpha_{i-1/2,j}^k|} & |\alpha_{i+1/2,j}^k|+|\alpha_{i-1/2,j}^k|\neq 0\\ 0 & \alpha_{i\pm1/2,j}^k=0\end{cases}$$

$$\theta_{i+1/2,j}^k=1+2\max(\theta_{i,j}^k,\theta_{i+1,j}^k)$$

这里 a^k、L^k、R^k 是雅可比矩阵 $A(w)=\dfrac{\partial f(w)}{\partial w}$的特征值与左右特征向量。$Q(x)$取(6-2-35)式。以上给出的格式中引入了 $\theta_{i,j}$，是为更好地处理接触间断[6]。

文献[9]还给出了适合于计算定常流动的隐式二阶 TVD 格式。

TVD 格式的精度可由以下的激波管问题的求解得到证明。图 6-2-3 给出了几个方法的比较。其控制方程为

$$\boldsymbol{U}_t+f(\boldsymbol{U})_x=0$$

这里$\boldsymbol{U}=(\rho,\rho\boldsymbol{U},\boldsymbol{E})^T$，$f(\boldsymbol{U})=(\rho u,p+\rho u^2,u(P+E))^T$。$\rho,u,P,E$ 分别是密度、速度、压力与总能。$P=(k-1)(E-\frac{1}{2}\rho u^2)$，$k=1.4$。求解的是一个黎曼问题，初始为

$$\boldsymbol{U}(x,0)=\boldsymbol{U}_L=(0.445,0.311,8.928)^T \qquad x<0$$

$$=\boldsymbol{U}_R=(0.5,0,1.4275)^T$$

图 6-2-3 中(a)是 Roe 的一阶格式的结果，可以看到明显的抹平效应；(b)是二阶格式的代表 L-W 格式的结果，可以看到明显的数值振荡；(c)、(d)是 TVD 格式的结果，(d)中使用了前述的 θ 来处理接触间断，可以看出 TVD 格式的高精度。

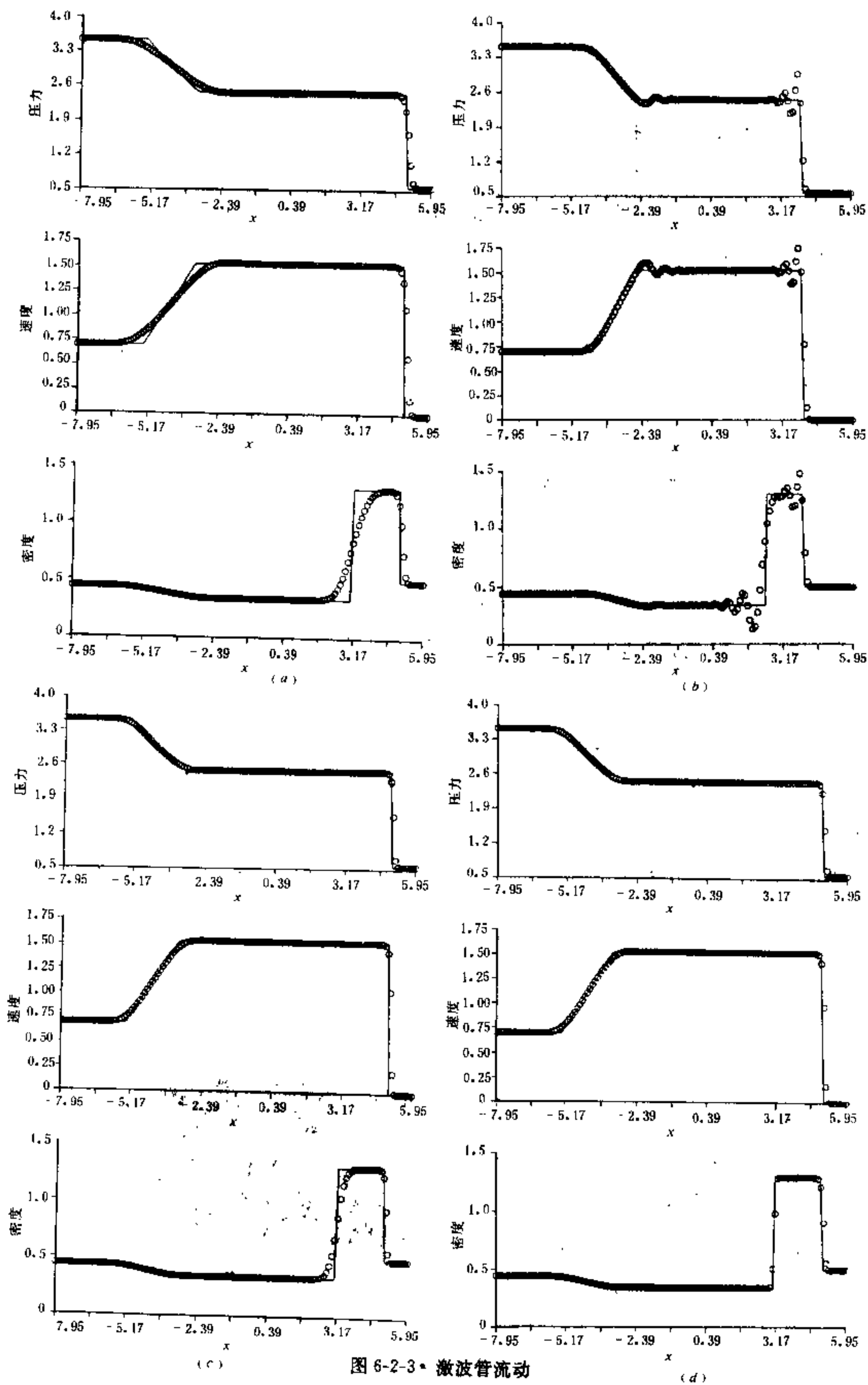


图 6-2-3 激波管流动

(a)Roe 一阶格式;(b)L-W 二阶格式;(c)、(d)、TVD 格式

6.2.4 斜率比通量限制因子

为了得到高分辨率的二阶精度显式 TVD 格式，可以在一阶格式中引入限制(修正)了的负耗散通量。在构造高精度格式时，一种方法是把通量限制因子取成斜率比的函数[10]，通常还希望构造的格式是 TVD 的。

考虑线性标量方程

$$u_t + au_x = 0 \qquad a > 0 \tag{6-2-36}$$

引入记号 $\Delta_+ y_j = \Delta y_{j+1/2} = \Delta_- y_{j+1} = y_{j+1} - y_j$

则 L-W 格式可以写成

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \sigma\Delta u_{j-1/2}^n - \Delta_-\left[\frac{1}{2}\sigma(1-\sigma)\Delta u_{j+1/2}^n\right] \tag{6-2-37}$$

其中 $\sigma = \dfrac{a\Delta t}{\Delta x}$，用 FCT 观点，L-W 格式可以看成一阶格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \sigma\Delta u_{j-1/2}^n \tag{6-2-38.1}$$

加上反耗散通量

$$-\frac{1}{2\lambda}(1-\sigma)\sigma\Delta u_{j+1/2}^n \tag{6-2-38.2}$$

的结果。由于 L-W 格式不是 TVD 的，我们在格式(6-2-37)式中加入修正了的反耗散通量

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \sigma\Delta u_{j-1/2}^n - \Delta_-\left[\varphi_j \frac{1}{2}\sigma(1-\sigma)\Delta u_{j+1/2}^n\right] \tag{6-2-39}$$

其中 φ_j 是限制因子，且 $\varphi_j \geqslant 0$ 以保持反扩散通量的符号。取 $\varphi_j = \varphi(r_j)$，其中

$$r_j = \frac{\Delta u_{j-1/2}^n}{\Delta u_{j+1/2}^n} \tag{6-2-40}$$

是斜率比。希望通过 $\varphi(r)$ 的选取使格式(6-2-39)式是 TVD 的。

利用(6-2-20)式，系数可取成

$$C_{j+1/2}^+ = 0, C_{j-1/2}^- = \sigma + \frac{1}{2}(1-\sigma)\frac{\sigma\Delta_-\left[\varphi(r_j)\Delta u_{j+1/2}^n\right]}{\Delta u_{j-1/2}^n} \tag{6-2-41}$$

$C_{j-1/2}^-$ 可以重新安排成

$$C_{j-1/2}^- = \sigma\left\{1 + \frac{1}{2}(1-\sigma)\left[\frac{\varphi(r_j)}{r_j} - \varphi(r_{j-1})\right]\right\} \tag{6-2-41'}$$

若

$$\left|\frac{\varphi(r_j)}{r_j} - \varphi(r_{j-1})\right| \leqslant \Phi \tag{6-2-42}$$

则

$$\sigma\left[1 - \frac{1}{2}(1-\sigma)\Phi\right] \leqslant C_{j-1/2}^- \leqslant \sigma\left[1 + \frac{1}{2}(1-\sigma)\Phi\right] \tag{6-2-43}$$

由(6-2-21)式知，(6-2-39)式是 TVD 格式的充分条件为 $0 \leqslant C_{j-1/2}^- \leqslant 1$；再由(6-2-43)式易知，必须 $\Phi \leqslant 2$；另外由于 $\varphi(r)$ 非负，所以限定 $r \leqslant 0$ 时 $\varphi(r) = 0$。于是(6-2-42)式化成

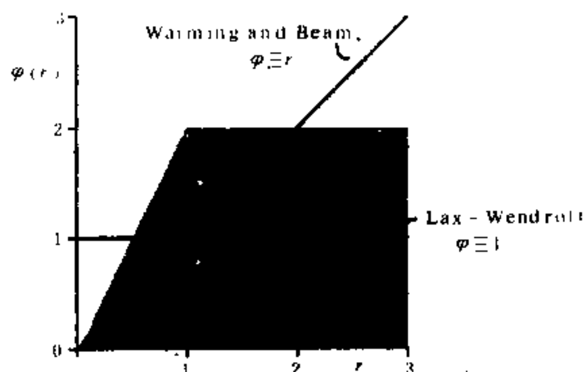


图 6-2-4 TVD 区域

$$0 \leqslant (\frac{\varphi(r)}{r}, \varphi(r)) \leqslant 2 \tag{6-2-44}$$

因此，格式(6-2-39)式是 TVD 格式的充分条件是 $\varphi(r)$落在图 6-2-4 的阴影区域内。

显然，L-W 格式相当于 $\varphi=1$，而 Warming and Beam[11]的二阶迎风格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \sigma\Delta u_{j-1/2}^n - \Delta_-[\frac{1}{2}\sigma(1-\sigma)\Delta u_{j-1/2}^n] \tag{6-2-45}$$

则相当于 $\varphi=r$，两者都落在域外，因而不是 TVD 的。

因为希望加入的反扩散通量尽可能大，所以应使满足 TVD 条件的通量限制因子尽可能大，于是选取

$$\varphi(r) = \begin{cases} \min(2r, 2) & r > 0 \\ 0 & r < 0 \end{cases} \tag{6-2-46}$$

即取图 6-2-4 阴影区的上边界。

我们的目的是选取 $\varphi(r)$，以得到二阶精度的 TVD 格式，所以应对 $\varphi(r)$做出更进一步的限制。另外注意到 $r\leqslant 0$ 时 $\varphi(r)=0$，在极值点附近，不可能达到二阶精度，这是 TVD 格式的特性。

注意到，依赖于点$(u_{j-2}, u_{j-1}, u_j, u_{j+1})$的二阶格式是 L-W 格式与 Warming and Beam 迎风格式的加权平均[12]，取两者的算术平均

$$\varphi(r) = [1-\theta(r)]\varphi^{LW}(r) + \theta(r)\varphi^{WB}(r) \tag{6-2-47}$$

其中 $0\leqslant\theta(r)\leqslant 1$，由于 $\varphi^{LW}(r)=1, \varphi^{WB}(r)=r$，于是

$$\varphi(r) = 1 + \theta(r)(r-1) \tag{6-2-47'}$$

被限制在图 6-2-5 的阴影区内。值得一提的是，由(6-2-47′)式知 $\varphi(1)=1$，这是二阶格式所具有的。

由此可定义由(6-2-42)式限定的一族限制因子

$$\varphi_\Phi(r) = \max(o, \min(\Phi r, 1), \min(r, \Phi)), 1 \leqslant \Phi \leqslant 2 \tag{6-2-48}$$

Φ 从 2→1 变动时，$\varphi_\Phi(r)$从图 6-2-5 阴影区的上边界到下边界变动，并取遍整个阴影区。典型的情如图 6-2-6。

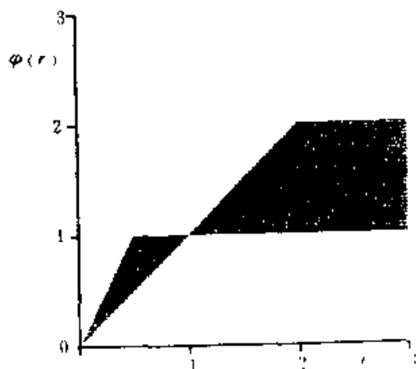


图 6-2-5 二阶 TVD 区域

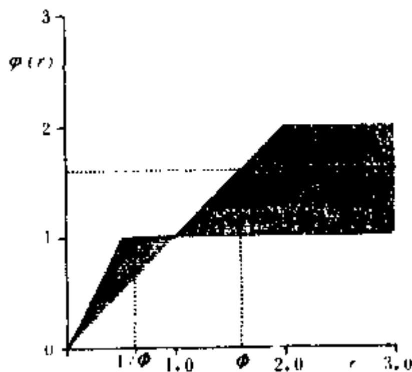


图 6-2-6 典型的 Φ 限制因子

下面看几个例子：

例 1 Van Leer[12]限制因子。Van Leer 给出“光滑度检测因子”(Smoothness monitor)

$$\theta_j = \frac{1}{r_j} = \frac{\Delta u_{j+1/2}^n}{\Delta u_{j-1/2}^n}$$

定义

$$S(\theta) = \frac{|\theta| - 1}{|\theta| + 1}$$

则其格式可写成

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \sigma\Delta u_{j-1/2}^n - \frac{\sigma}{4}(1-\sigma)(\Delta u_{j+1/2}^n - \Delta u_{j-3/2}^n)$$
$$+ \frac{\sigma}{4}(1-\sigma)[S(\theta_j)(\Delta u_{j+1/2}^n - \Delta u_{j-1/2}^n) - S(\theta_{j-1})(\Delta u_{j-1/2}^n - \Delta u_{j-3/2}^n)]$$

或写成(6-2-39)式的形式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \sigma\Delta u_{j-1/2}^n - \Delta\ [\frac{1}{2}(1 - S(\theta_j) + \frac{1+S(\theta_j)}{\theta_j})\ \frac{1}{2}\sigma(1-\sigma)\Delta u_{j+1/2}^n]$$

于是

$$\varphi_j = \frac{1}{2}[1 - S(\theta_j) + \frac{1+S(\theta_j)}{\theta_j}]$$

以 $\theta_j = 1/r_j$ 代入得

$$\varphi_{rL}(r) = \frac{|r| + r}{|r| + 1} = \begin{cases} 0 & r \leqslant 0 \\ \dfrac{2r}{r+1} & r > 0 \end{cases}$$

由图 6-2-7 可看出，$\varphi_{VL}(r)$落在二阶 TVD 区。

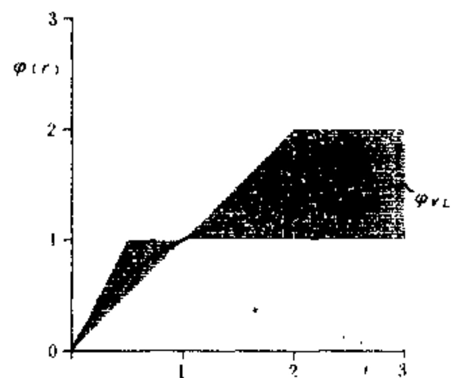


图 6-2-7 Van Leer 限制因子

例 2 Roe[13][14]限制因子。Roe 提出的二阶格式是

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \sigma\Delta u_{j-1/2}^n - \frac{1}{2}\sigma(1-\sigma)\Delta_-\ b_{j+1/2}$$

其中

$$b_{j+1/2} = B(\Delta u_{j+1/2}^n, \Delta u_{j-1/2}^n)$$

而 $B(x,y)$定义为

$$B(x,y) = \begin{cases} \min\bmod\ (x,y) & xy > 0 \\ 0 & xy \leqslant 0 \end{cases}$$

$$\min\bmod\ (x,y) = \begin{cases} x & |x| \leqslant |y| \\ y & |x| > |y| \end{cases}$$

于是很容易得出对应的通量限制因子

$$\varphi_R = \begin{cases} 1 & y/x > 1 \\ y/x & 1 \geqslant y/x > 0 \\ 0 & xy \leqslant 0 \end{cases}$$

此即

$$\varphi_R(r) = \varphi_1(r) = \max(0, \min(r, 1))$$

即其通量限制因子相当于(6-2-48)限定的 Φ 族限制因子取 $\Phi = 1$ 的情形，对应于图 6-2-5 的阴

影区的下边界。

Roe 后来又提出“Superbee”格式，相当于取

$$B(x,y)=\begin{cases}\max\bmod(x,y) & \frac{1}{2}\leqslant\frac{y}{x}\leqslant 2\\ 2\min\bmod(x,y) & 0<\frac{y}{x}<\frac{1}{2}\text{ 或}\frac{y}{x}>2\\ 0 & xy\leqslant 0\end{cases}$$

$$\max\bmod(x,y)=\begin{cases}x & |x|\geqslant|y|\\ y & |x|<|y|\end{cases}$$

对应的通量限制因子为

$$\varphi_{RC}(r)=\varphi_2(r)=\max(0,\min(2r,1),\min(r,2))$$

相当于(6-2-48)族中的 $\Phi=2$，是图 6-2-5 的上边界，也是最大可能的取值。

本节的讨论可以推广到非线性标量及方程组情形[10]，限于篇幅，这里从略。

§6.3 Godunov 型方法——间断分解法

在激波捕捉法中，人工粘性法是最早提出的并一直在得到应用和改进。为了更准确地捕捉激波，在使用人工粘性法时，从目前的观点看，一般应采用自适应网格技术，使激波区网格自动密集，以提高计算的精度和效率，从而抛弃等间距空间网格，希望通过采用自适应的非等间距网格在不增加网格数目的情况下，更准确地捕获激波。而上节简述的 FCT 等方法，可以看成是低阶格式与高阶格式之间的线性杂交方法。因为一般地，一阶格式利于处理间断而在光滑区精度较低；相反，二阶格式对光滑流动处理较好，却在间断附近引起伪振荡。杂交方法希望通过精心设计把两者的优点结合起来，在该类方法中，首先用低阶和高阶差分格式分别计算各种通量，接着利用当地流动参数的非线性函数作为权函数对这些通量进行线性组合，最后对这些混合通量进行差分得到新的守恒量。可以粗略地说，杂交方法企图仍采用等间距网格，通过精心设计的差分过程达到提高精度的目的。在人工粘性法和线性杂交法中，差分格式可以从微分方程中各项的泰勒系数展开导出，泰勒展开的前提是解充分光滑，在间断处不成立，因此或者引人人工粘性(非物理的、较大的粘性)，或者引人非物理的单调性约束。另一类处理间断问题的方法是 Godunov[15]于 1959 年提出的间断分解方法，它把偏微分方程组的解当成分段光滑的，然后在每个区域的边界解一个一维黎曼问题，并利用迎风格式得到下一时间步的解。这在处理强间断时十分优越。对 Godunov 方法现在有很多发展与改进。一方面可以用更高精度的分段近似代替流动参数的分布，从而提高精度。Godunov 是取分段常数分布，Van Leer[16~18]采用分段线性分布给出 MUSCL 格式，P. Woodward 和 P. Colella[19]采用分段抛物线分布给出 PPM 格式。另一方面，黎曼问题的求解方法是 Godunov 类型方法的一个关键，对此也有很多进一步的研究和发展，如文献[20]给出了对一般的气体状态方程的黎曼问题求解方法，文献[21]则提出了一种非迭代的方法。本节将介绍 MUCL 格式及 PPM 格式。MUSCL 有多种改型，这里仅介绍 Van Leer[18]的方法。本节还将介绍文献[21]的非迭代方法。

6.3.1 对流格式

为了避开黎曼问题的求解，先考虑线性对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{6-3-1.1}$$

$$u(x,0) = u_0(x) \tag{6-3-1.2}$$

并考虑非等间距空间步长。在实际计算中，非等间距空间网格更为常见，拉格朗日类型的方法且不必说，对欧拉型算法，若采用“和”分裂的两步法：拉格朗日步加上输运步，输运步把拉氏步结果变换到固定的欧拉网格上，此时输运步是守恒的对流算法，即便欧拉网格是等间距的，由于在拉格朗日步各网格运动速度不一致，输运步的网格仍是非等间距的。

设 $x_{j+1/2}$ 是第 j 个与第 $j+1$ 个网格的边界，且已知 t^n 时刻(6-3-1)式的解 $u(x,t^n)$ 在第 j 网格上的平均值

$$u_j^n = \frac{1}{\Delta x_j}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x,t^n)\mathrm{d}x \tag{6-3-2}$$

其中

$$\Delta x_j = x_{j+1/2} - x_{j-1/2}$$

是第 j 网格的空间步长。设 Δt 满足稳定性要求

$$a\Delta t \leqslant \min_j \delta x_j \tag{6-3-3}$$

为了得到 $t^{n+1}=t^n+\Delta t$ 时刻的平均解 u_j^{n+1}，Godunov 型方法的作法是首先构造分段多项式插值函数 $u(x)$，使满足

$$u_j^n = \frac{1}{\Delta x_j}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x,t^n)\mathrm{d}x \tag{6-3-4}$$

由于初值问题(6-3-1)式的解是

$$u(x,t^{n+1}) = u(x - a\Delta t,t^n) \tag{6-3-5}$$

从而

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta x_j}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x - a\Delta t,t^n)\mathrm{d}x \tag{6-3-6}$$

其迎风差分格式为

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{a\Delta t}{\Delta x_j}(\bar{u}_{j-1/2}^n - \bar{u}_{j+1/2}^n) \tag{6-3-7.1}$$

$$\bar{u}_{j+1/2}^n = \begin{cases} f_{j+1/2,L}^n(a\Delta t) & a \geqslant 0 \\ f_{j+1/2,R}^n(-a\Delta t) & a \leqslant 0 \end{cases} \tag{6-3-7.2}$$

$$f_{j+1/2,L}^n(y) = \frac{1}{y}\int_{x_{j+1/2}-y}^{x_{j+1/2}} u(x)\mathrm{d}x \tag{6-3-7.3}$$

$$f_{j+1/2,R}^n(y) = \frac{1}{y}\int_{x_{j+1/2}}^{x_{j+1/2}+y} u(x)\mathrm{d}x \tag{6-3-7.4}$$

于是有：

(1) Godunov 方法是取分段常数分布，即

$$u(x) = u_j^n \qquad x_{j-1/2} \leqslant x \leqslant x_{j+1/2} \tag{6-3-8}$$

若记库朗数

$$\sigma_j = \frac{|a|\Delta t}{\Delta x_j} \tag{6-3-9}$$

则其差分格式为

$$u_j^{n+1} = \begin{cases} u_j^n - \sigma_j(u_j^n - u_{j-1}^n) & a \geqslant 0 \\ u_j^n + \sigma_j(u_{j+1}^n - u_j^n) & a \leqslant 0 \end{cases} \tag{6-3-10}$$

是一阶迎风格式。

其求解步骤可以表示成图 6-3-1，首先确定初值分布的网格平均值((6-3-2)式，图 6-3-1-(1)所示)；接着进行对流((6-3-10)式，图 6-3-1-(2)所示)；然后按(6-3-2)式确定下一时间步的网格平均值(图 6-3-1—(3))；最后以此值作为下一时间步的开始(图 6—3-1-(4))。这样完成一个循环。

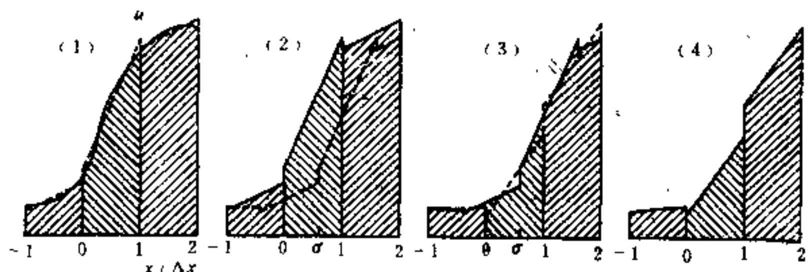


图 6-3-1 Godunov 格式示意图($a>0$，等间距)

(2) MUSCL 方法是取分段线性分布，即

$$u(x) = u_j^n + \frac{\overline{\Delta} u_j^n}{\Delta x_j}(x - x_j) \qquad x_{j-1/2} \leqslant x \leqslant x_{j+1/2} \tag{6-3-11.1}$$

或写成

$$\begin{aligned} u(x) &= u_{R,j} + \frac{\overline{\Delta} u_j^n}{\Delta x_j}(x - x_{j-1/2}) \\ &= u_{L,j} + \frac{\overline{\Delta} u_j^n}{\Delta x_j}(x - x_{j+1/2}) \qquad x_{j-1/2} \leqslant x \leqslant x_{j+1/2} \end{aligned} \tag{6-3-11.2}$$

其中

$$u_{R,j} = u_j^n + \frac{1}{2}\overline{\Delta} u_j^n \tag{6-3-11.3}$$

$$u_{L,j} = u_j^n - \frac{1}{2}\overline{\Delta} u_j^n \tag{6-3-11.4}$$

这里 $\overline{\Delta} u_j^n$ 是解在$(x_{j-1/2}, x_{j+1/2})$区间斜率的某种平均。依据 Δu_j^n 的取法，可以得到不同的格式。其差分格式为

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \begin{cases} -\sigma_j(u_j^n - u_{j-1}^n) - \dfrac{\sigma_j}{2}[(1-\sigma_j)\overline{\Delta} u_j^n - (1-\sigma_{j-1})\overline{\Delta} u_{j-1}^n] & a \geqslant 0 \\ \sigma_j(u_{j+1}^n - u_j^n) - \dfrac{\sigma_j}{2}[(1-\sigma_{j+1})\overline{\Delta} u_{j+1}^n - (1-\sigma_j)\overline{\Delta} u_j^n] & a \leqslant 0 \end{cases} \tag{6-3-12}$$

或写成

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \begin{cases} -\sigma_j(u_{R,j} - u_{R,j-1}) + \dfrac{\sigma_j}{2}[\sigma_j\overline{\Delta}u_j^n - \sigma_{j-1}\overline{\Delta}u_{j-1}^n] & \sigma \geqslant 0 \\ \sigma_j(u_{L,j+1} - u_{L,j}) + \dfrac{\sigma_j}{2}[(\sigma_{j+1}\overline{\Delta}u_{j+1}^n - \sigma_j)\overline{\Delta}u_j^n)] & a \leqslant 0 \end{cases} \tag{6-3-12'}$$

是二阶迎风格式。

其求解过程可以表示成图 6-3-2，与 Godunov 方法不同的是用线性分布(6-3-11)式取代(6-3-2)式。图中(1)表示用线性分布取代初值分布；(2)表示对流输运；(3)表示按(6-3-12)式求得新的网格平均值并进而决定线性分布方式；(4)为该时间步的结束。

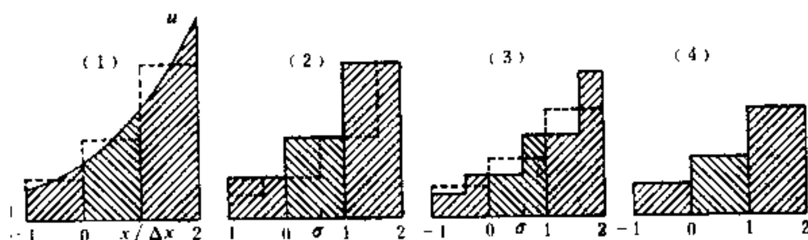


图 6-3-2 MUSCL 格式示意图($a>0$，等间距)

(3) PPM 方法是取分段抛物线插值函数，形如

$$u(x) = u_{L,j} + \xi(\overline{\Delta}u_j^n + u_{6,j}(1-\xi)) \qquad x_{j-1/2} \leqslant x \leqslant x_{j+1/2} \tag{6-3-13.1}$$

$$\xi = \frac{x - x_{j-1/2}}{\Delta x_j} \tag{6-3-13.2}$$

$$\overline{\Delta}u_j^n = u_{R,j} - u_{L,j} \tag{6-3-13.3}$$

$$u_{6,j} = 6(u_j^n - \frac{1}{2}(u_{R,j} + u_{L,j})) \tag{6-3-13.4}$$

$$u_{L,j} = \lim_{x \to x_{j-1/2}^+} u(x) \tag{6-3-13.5}$$

$$u_{R,j} = \lim_{x \to x_{j+1/2}^-} u(x) \tag{6-3-13.6}$$

关键是确定 $u_{L,j}$ 与 $u_{R,j}$。这个问题留待下一小节交待。差分格式是

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \begin{cases} -\sigma_j(u_{R,j} - u_{R,j-1}) + \dfrac{\sigma_j}{2}(\sigma_j\overline{\Delta}u_j^n - \sigma_{j-1}\overline{\Delta}u_{j-1}^n) \\ \quad - \dfrac{\sigma_j}{2}[\sigma_j(1 - \dfrac{2}{3}\sigma_j)u_{6,j} - \sigma_{j-1}(1 - \dfrac{2}{3}\sigma_{j-1})u_{6,j-1}] & a \geqslant 0 \\ \sigma_j(u_{L,j+1} - u_{L,j}) + \dfrac{\sigma_j}{2}(\sigma_{j+1}\overline{\Delta}u_{j+1}^n - \sigma_j\overline{\Delta}u_j^n) \\ \quad + \dfrac{\sigma_j}{2}[\sigma_{j+1}(1 - \dfrac{2}{3}\sigma_{j+1})u_{6,j+1} - \sigma_j(1 - \dfrac{2}{3}\sigma_j)u_{6,j}] & a \leqslant 0 \end{cases} \tag{6-3-14}$$

是三阶迎风格式。

其求解过程如图 6-3-3 所示。图中(1)表示已知其网格平均值给出分段抛物线分布；(2)表示对流效应；(3)表示由(6-3-2)求出新的网格平均后再确定抛物线分布；(4)是该时间步的最

终结果。

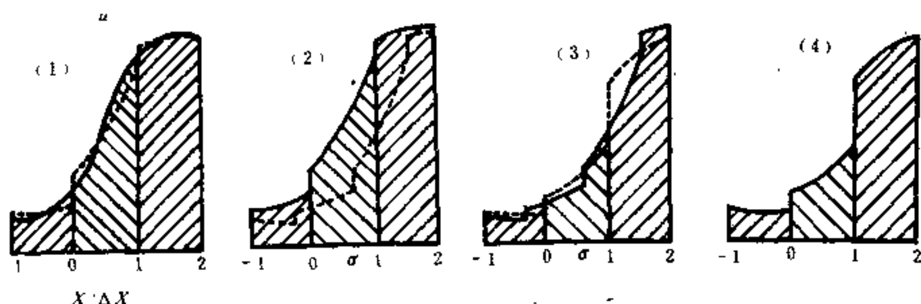


图 6-3-3　PPM 格式示意图($a>0$,等间距)

6.3.2　具体算法及单调约束

在已知本时间步的网格平均值 u_j^n 后,Godunov 方法的插值函数完全确定,而对 MUSCL 及 PPM 还需进一步给定其它参数。另外,由(6-3-10)式易知,Godunov 格式是单调格式,而 MUSCL 格式及 PPM 格式不是自动单调的,因此需给出单调约束。

一、MUSCL 格式单调限制

上面曾提到,平均斜率 $\overline{\Delta}u_j$ 的取法可以多种多样。MUSCL 的取法是取该网格两边界值之差

$$\overline{\Delta}u_j^n = u_{j+1/2}^n - u_{j-1/2}^n \tag{6-3-15}$$

对线性对流方程(6-3-1)式的定解问题,可由本时间步导出下一时间步的值。由(6-3-5)式

$$\begin{aligned}\overline{\Delta}u_j^{n+1} &= \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \frac{\partial u(x - a\Delta t)}{\partial x}\mathrm{d}x \\ &= u(x_{j+1/2} - a\Delta t) - u(x_{j-1/2} - a\Delta t)\end{aligned} \tag{6-3-16}$$

由(6-3-11)式可得

$$\overline{\Delta}u_j^{n+1} = \begin{cases} u_j^n - u_{j-1}^n + (\frac{1}{2} - \sigma_j)\overline{\Delta}u_j^n - (\frac{1}{2} - \sigma_{j-1})\overline{\Delta}u_{j-1}^n & a \geqslant 0 \\ u_{j+1}^n - u_j^n + (\frac{1}{2} - \sigma_{j+1})\overline{\Delta}u_{j+1}^n - (\frac{1}{2} - \sigma_j)\overline{\Delta}u_j^n & a \leqslant 0 \end{cases} \tag{6-3-17}$$

是二阶迎风格式。

按单调性要求,若 u_j^n 落在 u_{j-1}^n 与 u_{j+1}^n 之间,则 u_j^{n+1} 必须落在 u_{j-1}^{n+1} 与 u_{j+1}^{n+1} 之间。在实际中常采用以下的充分条件:如果 u_j^n 落在 u_{j-1}^n 与 u_{j+1}^n 之间,则对 $0<\sigma_j<1$,$a\underset{\Delta}{>}0$,u_j^{n+1} 必须落在 u_{j-1}^n 与 u_j^n 之间;对 $0<\sigma_j<1$,$a\underset{\Delta}{<}0$,u_j^{n+1} 必须落在 u_j^n 与 u_{j+1}^n 之间。

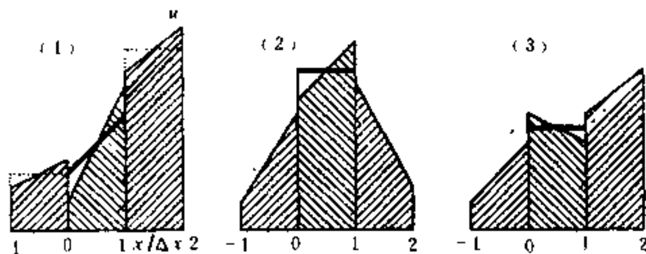


图 6-3-4　单调限制

由于格式(6-3-12)式不是单调格式,运用以上给出的过程求解时,可能导致单调性的破坏,因而在每一步需进行单调性检验,若提出以下的单调限制:

(1) 第 j 网格内的解落在第 $j-1$ 与 $j+1$ 格的网格平均值之间；

(2) 若在第 j 网格处达极值，则其斜率减为零；

(3) 若第 j 网格的斜率的符号与其邻格不同，则也置其斜率为零。

三种情形分别见图 6-3-4。则很容易导出下式

$$(\overline{\Delta}u_j^n)_{mono}=\begin{cases}\min(2|\Delta u_{j-1/2}^n|,2|\Delta u_{j+1/2}^n|,|\overline{\Delta}u_j^n|\mathrm{sgn}(\overline{\Delta}u_j^n)\\ \quad 若\ \mathrm{sgn}\Delta u_{j-1/2}^n=\mathrm{sgn}\Delta u_{j+1/2}^n=\mathrm{sgn}\overline{\Delta}u_j^n\\ 0 \quad 其余\end{cases} \tag{6-3-18}$$

若运用 FCT 技术，则有以下过程。对一阶单调格式(6-3-10)式，考虑 $a>0$，等间距，则

$$(u_j^{n+1})^*=u_j^n-\sigma(u_j^n-u_{j-1}^n) \tag{6-3-19}$$

利用(6-3-12)式得到经过通量修正的单调格式

$$u_j^{n+1}=(u_j^{n+1})^*-\frac{\sigma}{2}(1-\sigma)(\overline{\Delta}u_j^n-\overline{\Delta}u_{j-1}^n)_{mono} \tag{6-3-20}$$

其中

$$(\overline{\Delta}u_j^n)_{mono}=\begin{cases}\min[\frac{2}{\sigma(1-\sigma)}|\Delta(u_{j-1/2}^{n+1})^*|,\frac{2}{\sigma(1-\sigma)}|\Delta(u_{j+1/2}^{n+1})^*|,|\overline{\Delta}u_j^n|]\mathrm{sgn}(\overline{\Delta}u_j^n)\\ \quad 若\ \mathrm{sgn}\Delta(u_{j-1/2}^{n+1})^*=\mathrm{sgn}\Delta(u_{j+3/2}^{n+1})^*=\mathrm{sgn}\overline{\Delta}u_j^n\\ 0 \quad 其余\end{cases} \tag{6-3-21}$$

或取$\frac{2}{\sigma(1-\sigma)}$的极小值得到

$$(\overline{\Delta}u_j^n)_{mono}=\begin{cases}\min[8|(\Delta u_{j-1/2}^{n+1})^*|,8|(\Delta u_{j+3/2}^{n+1})^*|,|(\overline{\Delta}u_j^n)|]\mathrm{sgn}\overline{\Delta}u_j^n\\ 若\ \mathrm{sgn}(\Delta u_{j-3/2}^{n+1})^*=\mathrm{sgn}(\Delta u_{j+3/2}^{n+1})^*=\mathrm{sgn}\overline{\Delta}u_j^n\\ 0 \quad 其余\end{cases} \tag{6-3-22}$$

$a<0$ 时用 $\Delta(u_{j-3/2}^{n+1})^*$ 与 $\Delta(u_{j+1/2}^{n+1})^*$ 取代 $\Delta(u_{j-1/2}^{n+1})^*$ 与 $\Delta(u_{j+3/2}^{n+1})^*$ 即可。

以上两式给出的单调限制涉及四个网格，而(6-3-18)式只用到三个；另外它对斜率做出的限制比(6-3-18)式弱。可以通过(6-3-18)式与(6-3-21)式的对比得到与 σ 相关的单调约束，$a>0$ 时为

$$(\overline{\Delta}u_j^n)_{mono}=\begin{cases}\min[\frac{2}{\sigma}|\Delta u_{j-1/2}^n|,\frac{2}{1-\sigma}|\Delta u_{j+1/2}^n|,|\overline{\Delta}u_j^n|]\mathrm{sgn}\overline{\Delta}u_j^n\\ \quad 若\ \mathrm{sgn}\Delta u_{j-1/2}^n=\mathrm{sgn}\ \overline{\Delta}u_{j+1/2}^n=\mathrm{sgn}\Delta u_j^n\\ 0 \quad 其余\end{cases} \tag{6-3-23.1}$$

$a<0$ 时为

$$(\overline{\Delta}u_j^n)_{mono}=\begin{cases}\min[\frac{2}{1-\sigma}|\Delta u_{j-1/2}^n|,\frac{2}{\sigma}|\Delta u_{j+1/2}^n|,|\overline{\Delta}u_j^n|]\mathrm{sgn}\overline{\Delta}u_j^n\\ \quad 若\ \mathrm{sgn}\Delta u_{j-1/2}^n=\mathrm{sgn}\Delta u_{j+1/2}^n=\overline{\Delta}u_j^n\\ 0 \quad 其余\end{cases} \tag{6-3-23.2}$$

实际计算中经常用到的是(6-3-18)式与(6-3-23)式。

二、PPM 格式单调限制

为了给出分段抛物线分布式(6-3-13)，需确定 $u_{L,j}$ 及 $u_{R,j}$。为此先计算 u 在 $x_{j+1/2}$ 点的近似值 $u_{j+1/2}^n$，要求 $u_{j+1/2}^n$ 落在 u_j^n 与 u_{j+1}^n 之间。在光滑区取

$$u_{L,j+1} = u_{R,j} = u_{j+1/2}^n \tag{6-3-24}$$

此时插值函数 $u(x)$ 在 $x_{j+1/2}$ 点是连续的，但为使 $u(x)$ 在每个区间是单调函数，需对 $u_{L,j}$ 及 $u_{R,j}$ 进行调整，这导致在网格边界上的不连续。

具体过程如下：定义不定积分

$$A(x) = \int^x u(\xi, t^n)\mathrm{d}\xi \tag{6-3-25}$$

在网格边界 $x_{j+1/2}$，有

$$A(x_{j+1/2}) = A_{j+1/2} = \sum_{k\leqslant j} u_k^n \Delta x_k \tag{6-3-25'}$$

首先做通过以下五点：$(A_{j+k+1/2}, x_{j+k+1/2})$，$k=0,\pm1,\pm2$ 的四次多项式插值，再做微分得到 $u_{j+1/2}^n = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}x}\big|_{x_{j+1/2}}$，公式为

$$\begin{aligned} u_{j+1/2}^n = {} & u_j^n + \frac{\Delta x_j}{\Delta x_j + \Delta x_{j+1}}(u_{j+1}^n - u_j^n) \\ & + \frac{1}{\sum\limits_{K=-1}^{2} \Delta x_{j+k}} \Big[\frac{2\Delta x_j \Delta x_{j+1}}{\Delta x_j + \Delta x_{j+1}} \Big(\frac{\Delta x_{j-1} + \Delta x_j}{2\Delta x_j + \Delta x_{j+1}} - \frac{\Delta x_{j+2} + \Delta x_{j+1}}{2\Delta x_{j+1} + \Delta x_j} \Big)(u_{j+1}^n - u_j^n) \\ & - \Delta x_j \frac{\Delta x_{j-1} + \Delta x_j}{2\Delta x_j + \Delta x_{j+1}} \delta u_{j+1} + \Delta x_{j+1} \frac{\Delta x_{j+1} + \Delta x_{j+2}}{\Delta x_j + 2\Delta x_{j+1}} \delta u_j \Big] \end{aligned} \tag{6-3-26}$$

其中 δu_j 第 j 网格的平均斜率

$$\delta u_j = \frac{\Delta x_j}{\Delta x_{j-1} + \Delta x_j + \Delta x_{j+1}} \Big[\frac{2\Delta x_{j-1} + \Delta x_j}{\Delta x_{j+1} + \Delta x_j} \Delta u_{j+1/2}^n + \frac{\Delta x_j + 2\Delta x_{j+1}}{\Delta x_{j-1} + \Delta x_j} \Delta u_{j-1/2}^n \Big] \tag{6-3-27.1}$$

实际计算中对 δu_j 作如下的单调约束

$$(\delta u_j)_{mono} = \begin{cases} \min(|\delta u_j|, 2|\Delta u_{j-1/2}^n|, 2|\Delta u_{j+1/2}^n|)\mathrm{sgn}(\delta u_j) \\ \qquad 若\ \Delta u_{j-1/2}^n \Delta u_{j+1/2}^n > 0 \\ 0 \qquad\qquad 其余 \end{cases} \tag{6-3-27.2}$$

以保证 $u_{j+1/2}^n$ 落在 u_j^n 与 u_{j+1}^n 之间。若 j 网格落在间断区，则作如下的修正

$$u_{L,j} \to u_{j-1}^n + \frac{1}{2}(\delta u_{j-1})_{mono} = u_{L,j}^d \tag{6-3-28.1}$$

$$u_{R,j} \to u_{j+1}^n - \frac{1}{2}(\delta u_{j+1})_{mono} = u_{R,j}^d \tag{6-3-28.2}$$

当给出 $u_{L,j}$ 及 $u_{R,j}$ 之后，有时由(6-3-26)式确定的抛物线分布可能在某些区域的取值不在 $u_{L,j}$ 与 $u_{R,j}$ 之间，应加以调整。有两种可能：一种是 u_j^n 是局部极值，此时以常数分布取代(6-3-26)式，即

$$u_{L,j} \to u_j^n, u_{R,j} \to u_j^n \quad 若 (u_j^n - u_{L,j})(u_{R,j} - u_j^n) \leqslant 0 \tag{6-3-29.1}$$

另一种情形是 u_j^n 在 $u_{R,j}$ 与 $u_{L,j}$ 之间，但太靠近其中之一，至使抛物分布可能取超出 $u_{L,j}$ 与 $u_{R,j}$ 之间的值。出现这种情况时，在该网格的左右边界由(6-3-26)式确定的分布的一阶导数异号，可以验证此时 $|\Delta u_j^n| < |u_{6,j}|$，为保持单调性，此时应调整 $u_{L,j}$ 与 $u_{R,j}$ 中的一个。其作法是，当 u_j^n 太靠近 $u_{R,j}(u_{L,j})$ 时，调整 $u_{L,j}(u_{R,j})$ 以使 $j+1/2$ $(j-1/2)$ 处一阶导数为零，即

$$u_{L,j} \to 3u_j^n - 2u_{R,j} \quad 若\ \overline{\Delta} u_j^n u_{6,j} > (\overline{\Delta} u_j^n)^2 \tag{6-3-29.2}$$

$$u_{R,j} \to 3u_j^n - 2u_{L,j} \quad 若\ \overline{\Delta} u_j^n u_{6,j} < -(\overline{\Delta} u_j^n)^2 \tag{6-3-29.3}$$

在用(6-3-28)式进行修正时，需确定某网格是否落在间断区，为此应给出间断的判断准则。文献[19]给出如下的检测准则：一个网格被认为处于间断区，若其解的三阶导数的差分近似足够大，而二阶导数的差分近似在该网格改变符号，一阶导数与三阶导数的差分近似符号相反，最后，其间的跳跃足够大，具体过程是

$$u_{L,j}\rightarrow u_{L,j}(1-\eta_j)+\eta_j u_{L,j}^d \tag{6-3-30.1}$$

$$u_{R,j}\rightarrow u_{R,j}(1-\eta_j)+\eta_j u_{R,j}^d \tag{6-3-30.2}$$

$$\tilde{\eta}_j=\max(0,\min(\eta^{(1)}(\tilde{\eta}_j-\eta^{(2)}),1)) \tag{6-3-30.3}$$

$$\tilde{\eta}_j=\begin{cases}-\left(\dfrac{\delta^2u_{j+1}-\delta^2u_{j-1}}{x_{j+1}-x_{j-1}}\right)\left(\dfrac{(x_j-x_{j-1})^3+(x_{j+1}-x_j)^3}{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}\right) \\ \quad 若 -\delta^2u_{j+1}\delta^2u_{j-1},|u_{j+1}^n-u_{j-1}^n|-\epsilon\min(|u_{j+1}^n|,|u_{j-1}^n|)>0 \\ 0 \qquad\qquad 其余\end{cases} \tag{6-3-30.4}$$

$$\delta^2u_j=\frac{1}{\Delta x_{j-1}+\Delta x_j+\Delta x_{j+1}}\left(\frac{u_{j+1}^n-u_j^n}{\Delta x_{j+1}+\Delta x_j}-\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{\Delta x_j+\Delta x_{j-1}}\right) \tag{6-3-30.5}$$

$\eta^{(1)}$、$\eta^{(2)}$取为常数，文献[22]中取$\eta^{(1)}=20$，$\eta^{(2)}=0.05$；参数ϵ被用来确定解的多大的相对变动被当成间断，文献[22]中取$\epsilon=0.01$。这个间断检测过程只用在处理接触间断。

可以看出，MUSCL 方法与 PPM 方法同样要引入非物理的单调限制，且需经过精心设计。

6.3.3 黎曼问题求解

Godunov 类型方法的主要特点是把流动问题分成多个一维黎曼问题，黎曼问题求解的精度和效率是十分关键的课题。

一、*Godunov 迭代求解*

多维可压缩无粘流动的欧拉类型的求解方法可以分成两类。一类是直接求解欧拉方程组；另一类采用和分解，是二步法，由拉格朗日步加上一个输运步组成。由于爆炸力学问题一般是多介质的，在关心物质界面形状时，采用后一类方法较为有利，这里仅介绍后一类方法，所以从拉格朗日方程组出发。拉格朗日形式的控制体积方程为

$$m_j\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{U}_j}{\mathrm{d}t}=-\int_{S_j}P\boldsymbol{n}\mathrm{d}S \tag{6-3-31}$$

$$m_j\frac{\mathrm{d}\overline{E}_j}{\mathrm{d}t}=-\int_{S_j}P\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S \tag{6-3-32}$$

控制体是具有体积V_j和表面积S_j的计算网格，$\boldsymbol{n}$是其单位外法向，$m_j=\int_{V_j}\rho\mathrm{d}V$是网格质量，$\overline{\boldsymbol{U}}_j=\dfrac{1}{m_j}\int_{V_j}\rho\boldsymbol{U}\mathrm{d}V$是网格平均速度，$\overline{E}_j=\dfrac{1}{m_j}\int_{V_j}\rho(e+\dfrac{1}{2}\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U})\mathrm{d}V$是网格平均比总能，$\rho$、$\boldsymbol{U}$、$e$、$P$分别是密度、局部速度，比内能、压力，压力由状态方程$P=P(\rho,e)$给定。

可以看出，只要给出网格边界上的压力和速度就可以时间推进求解(6-3-31)和(6-3-32)式，质量守恒是$\dfrac{\mathrm{d}m_j}{\mathrm{d}t}=0$，网格边界的运动方程则是$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{U}$。

Godunov 方法是直接求解(6-3-31)式、(6-3-32)式，网格边界两边的网格平均量$\overline{\boldsymbol{U}}_j$、$\overline{E}_j$、$\tilde{\rho}_j=\dfrac{m_j}{V_j}$被用来得到黎曼问题的初值，它们是

(1) 法向速度 $\bar{u}_j=\bar{U}_j n$;

(2) 比内能 $\bar{e}_j=\bar{E}_j-\frac{1}{2}\bar{U}_j\cdot\bar{U}_j$;

(3) 密度 $\bar{\rho}_j$;

(4) 压力 $\bar{P}_j=P(\bar{e}_j,\bar{\rho}_j)$。

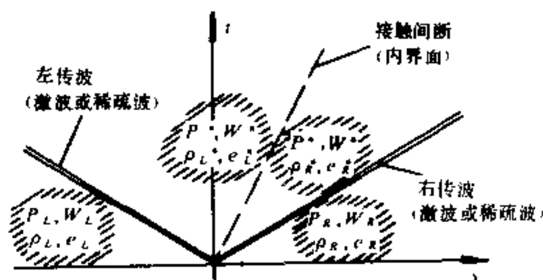


图 6-3-5 黎曼问题波系示意图

黎曼问题可以表示成如图 6-3-5。初始间断由左边量 ρ_L、e_L、P_L、u_L 及右边量 ρ_R、e_R、P_R、u_R 确定，初始间断被分解成一个接触间断和向两个方向传播的激波或稀疏波，在不出现空穴时，接触间断两边压力和法向速度相等(分别为 P^*、u^*)，而密度和比内能是间断的，其左、右边值分别为 ρ_L^*、e_L^* 和 ρ_R^*、e_R^*。

激波由 Rankine－Hugoniot 关系式确定

$$\Delta u_s=\pm W_s\Delta\tau_s \tag{6-3-33}$$

$$\Delta P_s=\mp W_s\Delta u_s \tag{6-3-34}$$

$$\Delta e_s=-\frac{1}{2}(P_s+P^*)\Delta\tau_s \tag{6-3-35}$$

其中 $\tau=\frac{1}{\rho}$ 是比容;$\Delta q_s=q_s^*-q_s$，下标 S 表示 L 或 R，符号"±"和"∓"中上边表示左传波，下边表示右传波。(6-3-34)式确定了雨贡尼奥曲线，W_s 是激波的传播速度，在这里取正值。

对于稀疏波，由于等熵，易得

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\tau}=\pm[-\frac{dp}{d\tau}]^{1/2}=\pm C=\pm\rho c \tag{6-3-36.1}$$

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}u}=\mp C \tag{6-3-37.1}$$

$$\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}\tau}=-P \tag{6-3-38.1}$$

其中 c 是音速，C 是拉格朗日音速或称音阻抗，由此可以积分出

$$\Delta u_S=\pm\int_{\tau_S}^{\tau_S^*}C\mathrm{d}\tau=\pm\int_{\tau_S}^{\tau_S^*}[-\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\tau}]^{1/2}\mathrm{d}\tau \tag{6-3-36.2}$$

$$\Delta P_S=\mp V_S\Delta u_S \tag{6-3-37.2}$$

$$\Delta e_S=-\int_{\tau_S}^{\tau_S^*}P\mathrm{d}\tau \tag{6-3-38.2}$$

V_S 是通过稀疏波的平均音阻抗，可以看出(6-3-36.2)～(6-3-38.2)式与(6-3-33)～(6-3-35)式十分类似。采用(6-3-34)式还是采用(6-3-37.2)式取决于 P^* 是大于还是小于 P_S。在熵增加的条件下，初始间断的分解是唯一的。

对于完全气体可以给出 W_S、V_S 的表达式

$$W_S=C[1+\frac{k+1}{2k}\frac{P^*-P_S}{P_S}]^{1/2}\qquad P^*\geqslant P_S \tag{6-3-39}$$

$$V_S=C\frac{k-1}{2k}\frac{1-P^*/P_S}{1-(\frac{P^*}{P_S})^{\frac{k-1}{2k}}}\qquad P^*<P_S \tag{6-3-40}$$

如此可以设计一套迭代格式，求出 P^*，进而求出 u^* 等。

在求出 P^*、u^* 之后，可由下述过程得出各特征线上的值。

令 $\xi=\frac{x}{t}=u\pm c$，对每一点，计算

$$x = \mathrm{Sgn}(\xi - u^*) \tag{6-3-4}$$

并定义

$$(\rho_S,P_S,u_S,e_S,W_S,c_S) = \begin{cases}(\rho_L,P_L,u_L,e_L,W_L,c_L) & x=-1\\(\rho_R,P_R,u_R,e_R,W_R,c_R) & x=1\end{cases} \tag{6-3-42.1}$$

$$\hat{u}_S = xu_S,\hat{\xi} = x\xi,\hat{u}^* = xu^* \tag{6-3-42.2}$$

对 $P^*>P_S$ 即激波，可由(6-3-33)、(6-3-34)式求出 ρ^*

$$\rho^* = [\rho_S^{-1} - \frac{P^* - P_S}{W_S^2}]^{-1}$$

并由(6-3-35)式求出 e^* 进而求出 c^*。对稀疏波即 $P^*<P_S$ 时，可由微分方程及状态方程求出 c^*，定义

$$\hat{\lambda}_S,\hat{\lambda}^* = \begin{cases}\hat{u}_S + c_S,\hat{u}^* + c^* & P^* < P_S\\ \hat{u}_S + \dfrac{W_S}{\rho_S} & P^* > P_S\end{cases} \tag{6-3-43}$$

则得 ξ 上的值

$$P,\rho,u = \begin{cases}P^*,\rho^*,u^* & \xi\leqslant\hat{\lambda}^*\\ P_S,\rho_S,u_S & \xi>\lambda_S\end{cases} \tag{6-3-44}$$

而对 $\lambda_S>\xi>\lambda^*$，该区域为稀疏波区，其分布可由特征线关系求解得出。

二、双波近似

比较激波关系式(6-3-33)与稀疏波方程(6-3-36′)式、(6-3-34)与(6-3-37′)式，可以发现，前者可看成是后者的差分近似。特别地，(6-3-35)式是积分式(6-3-38′)式的梯形律近似。进一步，可以写出

$$W_S = [-\frac{\Delta P_S}{\Delta\tau_S}]^{1/2}$$

$$V_S = \frac{-\Delta P_S/\Delta\tau_S}{\dfrac{1}{\Delta\tau_S}\displaystyle\int_{\tau_S}^{\tau_S^*}[-\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\tau}]^{1/2}\mathrm{d}\tau}$$

这表明

$$V_S = W_S + O(\Delta\tau_S^2) \tag{6-3-45}$$

该式表明，激波雨贡尼奥方程(6-3-34)式，在弱激波前提下是稀疏波方程(6-3-37′)式的很好的近似。因而把稀疏波当成膨胀激波，即做如下替代：

$V_S\doteq W_S$。这就是双波近似，是由 P. Colella[23]首先提出的，现在已得到广泛运用。

三、近似黎曼问题

如上所述，即便对于多方气体这类简单情形，黎曼问题的求解也需要进行迭代，正是在求解非线性黎曼问题上花费太多，妨碍了该类型方法的广泛应用，尤其对于具有复杂形式状态方程的材料，它们往往只具有列表形式的状态方程。

对于黎曼问题，文献[21]提出了近似解法，适合于一般状态方程且无需迭代，以下介绍该

方法。

人工粘性方法和 Godunov 方法都是激波捕捉法，两种方法都是向流场中加入适量的熵增，前者通过引入人工粘性的耗散作用达到，后者的熵增则隐含在黎曼问题解中的激波里。实际上，由激波雨贡尼奥曲线可以显式地导出的情形，其形式与通常使用的人工粘性的形式很类似。正是利用这种类比，文献[21]给出了非迭代的黎曼问题近似解法。

利用双波近似，只须考虑激波雨贡尼奥关系

$$\Delta P_S = \mp W_S \Delta u_S$$

对于多方气体 $P=(k-1)\rho e$，很容易导出

$$W_S = \frac{1}{4}(k+1)\rho_S|\Delta u_S| + \rho_S[c_S^2 + (\frac{k+1}{4}\Delta u_S)^2]^{1/2} \tag{6-3-46.1}$$

其中

$$c_S^2 = \frac{kP_S}{\rho_S} \tag{6-3-46.2}$$

是局部声速。同样对简单弹性固体

$$P = K(\frac{\rho}{\rho_o} - 1) \tag{6-3-47}$$

有

$$W_S = \frac{1}{2}\rho_S|\triangle u_S| + \rho_S[c_S^2 + (\frac{1}{2}\triangle u_S)^2]^{1/2} \tag{6-3-48.1}$$

$$c_S^2 = K/\rho_0 \tag{6-3-48.2}$$

c_S 同样是局部音速。可以看出，两者的激波雨贡尼奥曲线十分类似。

在极限情形，对强激波

$$\Delta P_S = \frac{k+1}{2}\rho_S(\Delta u_S)^2 \qquad \text{多方气体} \tag{6-3-49.1}$$

$$\Delta P_S = \rho_S(\Delta u_S)^2 \qquad \text{弹性固体} \tag{6-3-49.2}$$

对弱激波

$$\Delta P_S = \rho_S c_S|\Delta u_S| \tag{6-3-50}$$

对多方气体和弹性固体，c_S 分别取(6-3-46.2)式与(6-3-48。2)式。

人工粘性的作法是，在压力中引入

$$P' = P + q \tag{6-3-51}$$

最先引入的是 Von Neumann 二次粘性

$$q_2 = a_o^2\rho(\Delta x)^2(\frac{\partial u}{\partial x})^2 = a_o^2\rho(\Delta u)^2 \tag{6-3-52}$$

其中 a_o 是常数(约为 2)。后来 Landshoff 又引入线性形式的人工粘性

$$q_1 = a_L\rho c\Delta x\left|\frac{\partial u}{\partial x}\right| = a_L\rho c|\Delta u| \tag{6-3-53}$$

其中 c 是当地音速，a_L 是常数(约为 1)。人工粘性在 $\Delta u \geqslant 0$ 区域置为零。

比较(6-3-49)与(6-3-52)式、(6-3-50)与(6-3-53)式，可以发现两者是多么相似。文献[24]还由此导出人工粘性的系数。通常使用的人工粘性是两者之和

$$q = q_1 + q_2 = a_o^2\rho(\Delta u)^2 + a_L\rho c|\Delta u| \tag{6-3-54}$$

与此类似，以下式来近似激波雨贡尼奥关系

$$W_S = \rho_S(a_S + A_S|\Delta u_S|) \tag{6-3-55}$$

其中 a_S 与 A_S 是待确定的材料相关的系数。

例如，对多方气体或弹性固体，(6-3-46.1)、(6-3-48.1)式可以写成

$$W_S = \rho_S|x|G(c_S/|x|) \tag{6-3-56.1}$$

$$G(y) = 1 + (1 + y^2)^{1/2} \qquad 0 \leqslant y < \infty \tag{6-3-56.2}$$

$$|x| = \begin{cases} \frac{1}{4}(k+1)|\Delta u_S| & \text{多方气体} \\ \frac{1}{2}|\Delta u_S| & \text{弹性固体} \end{cases} \tag{6-3-56.3}$$

而

$$G(y) = 1 + (1+y)[1 - \frac{2y}{(1+y)^2}]^{1/2}$$
$$= 2 + y - \frac{y}{1+y} - \frac{1}{2}\frac{y^2}{(1+y)^3} + \cdots$$

对一阶近似

$$G_1(y) = 2 + y \tag{6-3-57.1}$$

$$W_S \doteq \rho_S(c_S + 2|x|) \tag{6-3-57.2}$$

由(6-3-55)式，a_S 与 A_S 分别是由弱激波、强激波极限得出的

$$a_S = \lim_{|\Delta u_S|/C_S \to 0} \frac{W_S}{\rho_S} \tag{6-3-58}$$

$$A_S = \lim_{|\Delta u_S|/C_S \to \infty} \frac{W_S}{\rho_S|\Delta u_S|} \tag{6-3-59}$$

由 R-H 关系式可导出

$$a_S = c_S = [\frac{\partial P}{\partial \rho}|_s + \frac{P_S}{\rho_S^2}\frac{\partial P}{\partial e}|_S]^{1/2} \tag{6-3-60}$$

$$A_S = \lim_{\Delta u_S/C_S \to \infty} [\frac{\rho_S^*/\rho_S}{\rho_S^*/\rho_S - 1}] \tag{6-3-61}$$

即 a_S 是局部音速，A_S 与强激波极限下的密度比相关。因此 a_S 与 A_S 可由状态方程及 R-H 关系式导出。

对一大类材料，其在无相转变时状态方程可拟合成直线

$$u_S = a_S + A_S u_p \tag{6-3-62}$$

其中 u_S 是材料中激波传播速度，u_p 是对应的波后粒子速度。如对 6061 铝，a_S=5.35km/s，A_s=1.34.[25]则当用激波雨贡尼奥关系

$$\Delta p_s = \rho_s(a_s + A_s|\Delta u_s|)\Delta u_s \tag{6-3-63}$$

时，是准确的。

在建立了近似激波雨贡尼奥关系以后，就可以来求解黎曼问题。对于右传波

$$P^* - P_R = \rho_R(a_R + A_R\Delta u_R)\Delta u_R \tag{6-3-64}$$

由于对右传波必须保证雨贡尼奥曲线有正的斜率，即上式只在

$$u^* \geqslant u^*_{\min} = u_R - \frac{a_R}{2A_R} \tag{6-3-65}$$

下成立。在数值计算中采用下式，把它推广到所有的 u^*

$$P^* - P'_R = \rho_R A_R |u^* - u^*_{min}|(u^* - u_{min}) \quad (6\text{-}3\text{-}66.1)$$

$$P'_R = P_R - \frac{1}{4}\rho_R a_R{}^2 / A_R \quad (6\text{-}3\text{-}66.2)$$

同样对左传波

$$P^* - P_L = -\rho_L(a_L - A_L \Delta u_L)\Delta u_L \quad (6\text{-}3\text{-}67)$$

由于应保证雨贡尼奥曲线的负斜率，其成立的范围是

$$u^* \leqslant u^*_{max} = u_L + \frac{a_L}{2A_L} \quad (6\text{-}3\text{-}68)$$

在数值计算中采用

$$P^* - P'_L = -\rho_L A_L |u^* - u^*_{max}|(u^* - u^*_{max}) \quad (6\text{-}3\text{-}69.1)$$

$$P'_L = P_L - \frac{1}{4}\rho_L a_L^2 / A_L \quad (6\text{-}3\text{-}69.2)$$

从(6-3-66.1)式与(6-3-69.1)式消除 P^* 得

$$\rho_R A_R |u^* - u^*_{min}|(u^* - u^*_{min}) + \rho_L A_L |u^* - u^*_{max}|(u^* - u^*_{max}) + P'_R - P'_L = 0 \quad (6\text{-}3\text{-}70)$$

这是关于 u^* 的二次方程。通过假定 $(u^* - u^*_{min})$ 与 $(u^* - u^*_{max})$ 的符号可得四种情况，每种情况中有一个根可以预先排除，余下的四个解中只有一个符合关于 $(u^* - u^*_{min})$ 与 $(u^* - u^*_{max})$ 符号的假定，如此可得唯一解。进而可求出 P^* 等。

以上的过程还可以处理空穴生成。给定材料可以抵抗的最大拉应力(如空气为0)，在求出 P^* 大于最大拉应力时，置 $P^*=0$，由(6-114.1)式与(6-3-69.1)式就可求出两个分开的边界各自的运动速度。

利用上述黎曼问题近似求解方法，在洛斯·阿拉莫斯国家实验室编制了三维 Gudonov 型的 ALE 程序 CAVEAT[26]。CAVEAT 按 (x,y,z) 三个方向求解三个一维黎曼问题，由于其所采用的黎曼求解算子是非迭代型的，所以其计算量大约与用人工粘性法相当。CAVEAT 具有重分网格的功能，可以启动重分功能移动网格点，从而维持网格的等间距，通过选择是否连续重分可以得到纯欧拉或拉格朗日型的算法，CAVEAT 是 ALE 型算法，适于大变形计算。它是显式方法，时间一阶、空间一阶或二阶精度，并采用了通量修正技术，对强激波模拟时，典型的激波宽度是两个或三个计算网格。

6.3.4 一维拉格朗日型 MUSCL 格式

一维拉格朗日型方程组为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f(U)}{\partial m} = h \quad (6\text{-}3\text{-}71)$$

其中 $\boldsymbol{U}=(\tau,u,E)^T$，$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{U})=(-x^\alpha u, x^\alpha P, x^\alpha uP)^T$，$\boldsymbol{h}=(0,\alpha\tau P/x,0)^T$。$\tau,u,E$ 分别是比容，速度、比总能，m 是质量坐标，密度 $\rho=1/\tau$，压力 $P=(k-1)\rho e$，比内能 $e=E-u^2/2$。α 在平面、轴对称和球对称时分别取0,1,2。x 是空间坐标，满足常微分方程 $\frac{dx}{dt}=u(m,t)$，空间坐标 x，体积坐标 V 与质量坐标之间关系为

$$dm = \tau^{-1}x^\alpha dx = \tau^{-1}dV \quad (6\text{-}3\text{-}72)$$

对完全气体，拉格朗日音速 $C^2=kP/\tau$，可导出特征方程

$$\frac{\partial P}{\partial t}+C^2\frac{\partial \tau}{\partial t}=0 \tag{6-3-73}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}-C^{-1}\frac{\partial P}{\partial t}\right)-x^{\alpha}C\left(\frac{\partial u}{\partial m}-C^{-1}\frac{\partial P}{\partial m}\right)=\frac{\alpha u\tau C}{x} \tag{6-3-74}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}+C^{-1}\frac{\partial P}{\partial t}\right)+x^{\alpha}C\left(\frac{\partial u}{\partial m}+C^{-1}\frac{\partial P}{\partial m}\right)=-\frac{\alpha u\tau C}{x} \tag{6-3-75}$$

t^n 时刻第 j 网格守恒量 U 的质量平均为

$$U_j^n=\frac{1}{\Delta m_j}\int_{m_{j-1/2}}^{m_{j+1/2}}U(m,t^n)dm \tag{6-3-76}$$

其斜率为

$$\Delta U_j^n=U_{j+1/2}^n-U_{j-1/2}^n \tag{6-3-77}$$

在拉格朗日格式中，采用压力而不是比总能较方便(比总能在 remapping 步中用到)，有

$$e_j^n=E_j^n-\frac{1}{2}u_j^n u_j^n \tag{6-3-78}$$

$$P_j^n=P(\tau_j^n,e_j^n) \tag{6-3-79}$$

$$\overline{\Delta}e_j^n=\overline{\Delta}E_j^n-u_j^n\overline{\Delta}u_j^n \tag{6-3-80}$$

$$\overline{\Delta}P_j^n=P_j^n\left(\frac{\overline{\Delta}e_j^n}{e_j^n}-\frac{\overline{\Delta}\tau_j^n}{\tau_j^n}\right) \tag{6-3-81}$$

MUSCL[18]方法给出黎曼问题初值(以"+"、"−"分别记边界右、左侧值)

$$\boldsymbol{U}_{j+1/2,\pm}^n=\left(\boldsymbol{U}\mp\frac{1}{2}\overline{\Delta}\boldsymbol{U}\right)_{j+1/2\pm1/2}^n \tag{6-3-83}$$

这里 U 中用 P 代替 E。*MUSCL* 以此作为初值求解黎曼问题得出对应的 $P_{j+1/2}^*$、$u_{j+1/2}^*$、$\tau_{j+1/2,\pm}^*$ 等，考虑到网格内流动参数分布是非均匀的，为了得到一个时间步内的平均效应，需给出 $U_{j+1/2}^*$ 的时间变化率 $\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_{j+1/2}^*$，$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{j+1/2}^*$，$\left(\frac{\partial \tau}{\partial t}\right)_{j+1/2,\pm}^*$，这是由特征方程(6-3-73)～(6-3-75)式给出的

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{j+1/2}^*-\frac{1}{C_{j+1/2,+}^*}\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_{j+1/2}^*-x_{j+1/2}^{\alpha}W_{j+1/2,+}\left(\frac{\partial u}{\partial m}-\frac{1}{C}\frac{\partial P}{\partial m}\right)_{j+1/2,+}$$
$$=-x_{j+1/2}^{\alpha}\left(\frac{\tau^*-\tau}{4\tau}\right)_{j+1/2,+}\left(\frac{\partial P}{\partial m}+C^2\frac{\partial \tau}{\partial m}\right)_{j+1/2,+}+\frac{\alpha}{x_{j+1/2}}\left[\frac{C}{2W}(u\tau C+u^*\tau^*C^*)\right]_{j+1/2,+} \tag{6-3-84}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{j+1/2}^*+\frac{1}{C_{j+1/2,-}^*}\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_{j+1/2}^*+x_{j+1/2}^{\alpha}W_{j+1/2,-}\left(\frac{\partial u}{\partial m}+\frac{1}{C}\frac{\partial P}{\partial m}\right)_{j+1/2,-}$$
$$=-x_{j+\frac{1}{2}}^{\alpha}\left(\frac{\tau^*-\tau}{4\tau}\right)_{j+1/2,-}\left(\frac{\partial P}{\partial m}+C^2\frac{\partial \tau}{\partial m}\right)_{j+1/2,-}$$
$$-\frac{\alpha}{x_{j+1/2}}\left[\frac{C}{2W}(u\tau C+u^*\tau^*C^*)\right]_{j+1/2,-} \tag{6-3-85}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_{j+1/2}^*+\left(C^2\frac{\partial \tau}{\partial t}\right)_{j+1/2,\pm}^*=0 \tag{6-3-86}$$

其中 $W_{j+1/2,\pm}$ 是向两个方向传播的波速。

若以半时间步上的值作为时间平均值，则可得以下过程

$$U^{n+1/2}_{j+1/2,\pm} = U^{*}_{j+1/2,\pm} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)^{*}_{j+1/2,\pm}\Delta t \tag{6-3-87}$$

$$x^{n+1/2}_{j+1/2} = x^{n}_{j+1/2} + \frac{1}{2}u^{*}_{j+1/2}\Delta t \tag{6-3-88}$$

其中 $u^{*}_{j+1/2,+}=u^{*}_{j+1/2,-}=u^{*}_{j+1/2}, P^{*}_{j+1/2,+}=P^{*}_{j+1/2,-}=P^{*}_{j+1/2}$。于是可得到下一时间步空间坐标及体积坐标

$$x^{n+1}_{j+1/2} = x^{n}_{j+1/2} + u^{n+1/2}_{j+1/2}\Delta t \tag{6-3-89}$$

$$V^{n+1}_{j+1/2} = (x^{n+1}_{j+1/2})^{\alpha+1}/(\alpha+1) \tag{6-3-90}$$

对方程(6-3-72)式积分得

$$\tau^{n+1}_{j} = \frac{V^{n+1}_{j+1/2} - V^{n+1}_{j-1/2}}{\Delta m_j} \tag{6-3-91}$$

$$u^{n+1}_{j} = u^{n}_{j} - \frac{\Delta t}{\Delta m_j}\Big[(x^{n+1/2}_{j+1/2})^{\alpha}P^{n+1/2}_{j+1/2} - (x^{n+1/2}_{j-1/2})^{\alpha}P^{n+1/2}_{j-1/2} - \frac{1}{2}(P_{j-1/2} + P_{j+1/2})^{n+1/2}\big((x^{n+1/2}_{j+1/2})^{\alpha} - (x^{n+1/2}_{j-1/2})^{\alpha}\big)\Big] \tag{6-3-92}$$

$$E^{n+1}_{j} = E^{n}_{j} - \frac{\Delta t}{\Delta m_j}\Big[(x^{n+1/2}_{j+1/2})^{\alpha}u^{n+1/2}_{j+1/2}p^{n+1/2}_{j+1/2} - (x^{n+1/2}_{j-1/2})^{\alpha}u^{n+1/2}_{j-1/2}p^{n+1/2}_{j-1/2}\Big] \tag{6-3-93}$$

下一个时间步的初值及斜率为

$$\tau^{n+1}_{j+1/2,\pm} = \tau^{*}_{j+1/2,\pm} + \left(\frac{\partial \tau}{\partial t}\right)^{*}_{j+1/2,\pm}\Delta t \tag{6-3-94}$$

$$u^{n+1}_{j+1/2} = u^{*}_{j+1/2} + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^{*}_{j+1/2}\Delta t \tag{6-3-95}$$

$$P^{n+1}_{j+1/2} = P^{*}_{j+1/2} + \left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)^{*}_{j+1/2}\Delta t \tag{6-3-96}$$

$$\overline{\Delta}\tau^{n+1}_{j} = \tau^{n+1}_{j+1/2,-} - \tau^{n+1}_{j-1/2,+} \tag{6-3-97}$$

$$\overline{\Delta}u^{n+1}_{j} = u^{n+1}_{j+1/2} - u^{n+1}_{j-1/2} \tag{6-3-98}$$

$$\overline{\Delta}p^{n+1}_{j} = p^{n+1}_{j+1/2} - p^{n+1}_{j-1/2} \tag{6-3-99}$$

若需变回到欧拉网格，则 $\overline{\Delta}p^{n+1}_{j}$ 需变回到 $\overline{\Delta}E^{n+1}_{j}$。

在以上的计算中，为了保持单调性或正值法，MUSCL 方法对每个网格内的物理量的斜率做出限制。在每个拉格朗日步的开始，利用(6-3-18)式引入的限制

$$(\overline{\Delta}U^{n}_{j})_{mono} = \begin{cases} \min[2|\Delta U^{n}_{j-1/2}|, 2|\Delta U^{n}_{j+1/2}|, |\overline{\Delta}U^{n}_{j}|]\mathrm{sgn}(\overline{\Delta}U^{n}_{j}) \\ \qquad 若\ \mathrm{sgn}(\Delta U^{n}_{j-1/2}) = \mathrm{sgn}(\Delta U^{n}_{j+1/2}) = \mathrm{sgn}(\overline{\Delta}U^{n}_{j}) \\ 0 \qquad 其余 \end{cases} \tag{6-3-100}$$

其中 $U=(\tau,u,P)^{T}$。

在进行回复到欧拉网格的 remapping 步时，用(6-3-23)式进行单调限制

$$(\overline{\Delta}U^{n+1}_{j})_{mono} = \begin{cases} \min\Big[\frac{2}{\varphi_{j+1/2}}|\Delta U^{n+1}_{j-1/2}|, \frac{2}{1-\varphi_{j+1/2}}|\Delta U^{n+1}_{j+1/2}|, |\overline{\Delta}U^{n+1}_{j}|\Big]\mathrm{sgn}(\overline{\Delta}U^{n+1}_{j}) \\ \qquad 若\ \mathrm{sgn}(\Delta U^{n+1}_{j-1/2}) = \mathrm{sgn}(\Delta U^{n+1}_{j+1/2}) = \mathrm{sgn}(\overline{\Delta}U^{n+1}_{j}) \\ 0 \qquad 其余 \end{cases} \tag{6-3-101}$$

其中

$$\varphi_{j+1/2}=\frac{m_{j+1/2}^{n}-m_{j+1/2}^{n+1}}{\Delta m_j} \tag{6-3-102}$$

是 j 网格通过边界 $j+1/2$ 的质量所占质量份额。其中 U 取 u,E。U 不取 τ，是因为 $\overline{\Delta}\tau_j^{n+1}$ 的改变会导致质量份额的改变，从而又反馈到(6-3-101)式中。代之以 $\tilde{\Delta}\rho_j^{n+1}$ 的单调限制，且以体积份额取代(6-3-101)式中的质量份额。

如前所述，象(6-3-100)式这样的通量限制存在 Clipping 效应，于是代之以较弱的限制

$$(\overline{\Delta}U_j^{n+1})_{mono}=\begin{cases}\min[2|U_{j+1/2}^{n+1}-U_j^{n+1}|,\\ 2|U_j^{n+1}-U_{j-1/2}^{n+1}|,|U_{j+1/2}^{n+1}-U_{j-1/2}^{n+1}|]\mathrm{sgn}(U_{j+1/2}^{n+1}-U_{j-1/2}^{n+1})\\ \quad 若\ \mathrm{sgn}(U_{j+1/2}^{n+1}-U_j^{n+1})=\mathrm{sgn}(U_j^{n+1}-U_{j-1/2}^{n+1})=\mathrm{sgn}(U_{j+1/2}^{n+1}-U_{j-1/2}^{n+1})\\ 0 \qquad 其余\end{cases} \tag{6-3-103}$$

文献[18]提出的 MUSCL 格式难以处理很强的激波，文献[27]提出了改进的 MUSCL 格式，采用一步欧拉方法，可以处理强激波。

6.3.5 一维拉格朗日型 PPM 格式

一维拉格朗日型 PPM 方法同样分成三步：物理量的分段抛物插值；初始间断的分解；时间推进求解。其出发方程组与 6.3.4 节相同。

物理量的插值步按 6.3.1 节的(6-3-13)式及 6.3.2 节中所描述的过程进行，所不同的是此时采用的是质量坐标，而网格平均量分别取 τ_j^n,u_j^n 和 P_j^n。采用 P 而不是 E 是为了在拉格朗日步中，在激波附近的网格对 P 进行插值计算时，应用前述的单调限制，从而更好地表征激波。同样，压力的网格平均值 P_j^n 是由状态方程给出的。在求物理量的插值式时，无需利用(6-3-30)式给出的间断检测，因为在拉格朗日步的计算中，接触间断是自动保持的。(6-3-30)式在 remapping 步中使用。

PPM 方法的黎曼问题求解与 MUSCL 方法不同，它以网格边界的依赖区内的平均值作为初始值，由(6-3-7)式

$$U_{j+1/2,-}^n=f_{j+1/2,L}^U(\Delta t C_j^n A_j^n) \tag{6-3-104.1}$$

$$U_{j+1/2,+}^n=f_{j+1/2,R}^U(\Delta t C_{j+1}^n A_{j+1}^n) \tag{6-3-104.2}$$

其中 $U=\tau,u,P,t^{n+1}=t^n+\Delta t,C$ 是音阻抗，

$$A_j^n=\frac{(x_{j+1/2}^n)^{\alpha+1}-(x_{j-1/2}^n)^{\alpha+1}}{(\alpha+1)(x_{j+1/2}^n-x_{j-1/2}^n)} \tag{6-3-105}$$

利用双波近似求解该黎曼问题，可得出 $P_{j+1/2}^*,u_{j+1/2}^*$ 等。其过程可表示成图 6-3-6：*a*)表示网格边界的两个依赖区是在时间步的结尾声波传到的界面；*b*)表示用质量平均值代替两个依赖区内的分段抛物分布；*c*)表示黎曼问题的解，图中所示左传和右传的分别是稀疏波和激波。

最后对守恒方程(6-3-71)式进行差分近似，可得下一时刻的网格平均值等

$$x_{j+1/2}^{n+1}=x_{j+1/2}^n+\Delta t u_{j+1/2}^* \tag{6-3-106}$$

$$A_{j+1/2}^*=\frac{(x_{j+1/2}^{n+1})^{\alpha+1}-(x_{j+1/2}^n)^{\alpha+1}}{(\alpha+1)u_{j+1/2}^*\Delta t} \tag{6-3-107}$$

$$\tau_j^{n+1}=\frac{(x_{j+1/2}^{n+1})^{\alpha+1}-(x_{j-1/2}^{n+1})^{\alpha+1}}{(\alpha+1)\Delta m_j} \tag{6-3-108}$$

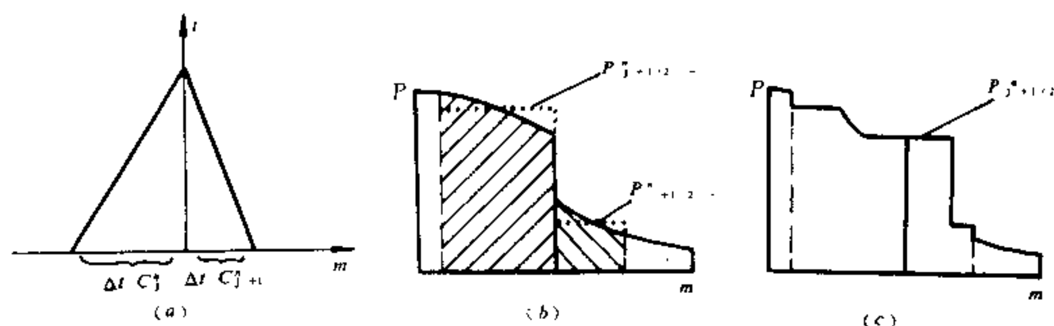


图 6-3-6 PPM 法黎曼问题求解示意图

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2}(A_{j+1/2}^* + A_{j-1/2}^*)\frac{\Delta t}{\Delta m_j}(P_{j-1/2}^* - P_{j+1/2}^*) \tag{6-3-109}$$

$$E_j^{n+1} = E_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta m_j}(A_{j-1/2}^* u_{j-1/2}^* P_{j-1/2}^* - A_{j+1/2}^* u_{j+1/2}^* P_{j+1/2}^*) \tag{63 — 110}$$

如此完成一个拉格朗日步。

文献[22]比较了 Godunov 类型方法、ETBFCT、人工粘性型方法的精度。Godunov 类型方法包括了 PPM 方法、MUSCL 格式与 Godunov 格式，其中 PPM 法分一步欧拉法与拉格朗日—欧拉法两种；ETBFCT 即前面介绍的 FCT 格式；人工粘性法选取了两步法的 BBC 格式和 MacCormack 格式。用上述各方法对一维冲击波相互作用问题进行了模拟。其初始条件如下：长度为 1.0 的一维管道内充满了 $k=1.4$ 的密度 $\rho=1.0$ 的静止多方气体，两端为刚性壁条件，初始压力条件为

$$P = \begin{cases} 1000 & 0.0 \leqslant x \leqslant 0.1 \\ 0.01 & 0.1 < x < 0.9 \\ 100 & 0.9 \leqslant x \leqslant 1.0 \end{cases}$$

在以上所给的初始间断条件下的流动现象将是十分复杂的：两道强激波向中心传播，并相互作用，形成新的接触间断；向两端传播的稀疏波在反射壁作用下形成反射，并与激波相互作用，形成十分复杂的波系结构。该问题常用来检测数值方法的精度和可靠性。用上述方法对该问题模拟的结果表明：PPM 方法（包括一步法和两步法）精度最高，以下依次为 MUSCL、ETBFCT、BBC、MacCormack 格式、Godunov 格式。象 PPM 这样的高阶 Godunov 类型的方法，由于采用了流动参量的高阶表达，以及对流动中不连续区域网格边界上通量的精心计算，达到了高精度。

§ 6.4 数值网格生成

流体力学数值计算总是要在一定的求解域求解一个偏微分方程组的初边值问题。在数值求解该偏微分方程组时，能否准确地表达边界条件，是数值计算能否成功的一个重要因素，它关系到数值解的精度及方法的收敛性。

众所周知，有限元方法易于处理任意求解域，对于有限差分方法，边界条件的数值表达往往取决于坐标系的选取。在传统的方法中，常常取笛卡尔坐标系，对于复杂边界，难于精确拟合边界形状和表述边界条件。对于曲边界，往往用锯齿形边界来拟合真实边界，由于边界点未必

是网格点，边界条件需用插值法或其它近似方法给出，从而不可避免地要引入误差，使计算精度降低，收敛性能恶化。

曲边边界问题即复杂几何形状问题是计算力学面临的重要课题之一。近些年来，发展了很多处理曲边界的方法。在一般的差分方法中，一个十分自然的选择是采用贴体坐标系，使物面边界点成为网格点，这样，狄利克莱条件可以准确给定，Neumann 条件也只须使用普通的差分离散就可表达，从而提高了表达物面边界条件的准确性。

采用贴体坐标系(body-fitted coordinate system)计算偏微分方程边值问题的关键是如何生成网格。能生成既与物理特性相适应又便于计算的网格，可以使定常问题计算过程中的迭代次数大为减少，数值解收敛加快，从而大大节约机时。经过近 20 年的发展，已开发了各类高效的网格生成技术，基于贴体坐标系的网格生成技术近年来已广泛被有限差分法所采用，可以说，数值网格生成技术大大完善了有限差分方法。

本节和下节将对常用的网格生成技术进行简单的归类和介绍，读者若想详细了解网格生成技术，可参看文献[28]、[29]和[30]。

6.4.1 网格生成的基本作法

为简便起见，以下只考虑二维问题。

采用贴体坐标系求解偏微分方程组，总是希望找到某种坐标变换，通过该变换把物理平面，设其上有笛卡尔系(x,y)(当然也可从别的坐标系出发)变到计算平面(ξ,η)，使物理平面内不规则的求解域变到计算平面内规则的求解域，一般情形下是变换到矩形域，有时也可变到其它规则域，如圆域；并使曲网格变到直网格、曲边界变成直边界。即在物理平面内建立了曲线坐标系，所有的边界都成为坐标线。在引入贴体坐标系后，对控制方程组进行同样的变换，数值计算在具有规则求解域的计算平面内进行。

由于数值计算是在计算平面内进行的，数值离散过程很简便，多种在笛卡尔坐标系下发展起来的算法都能方便地运用。即便对非定常问题，物理平面内坐标线随时间变动，求解域和网格边界也随时间变化，如果求解的是变形体的绕流问题，因为计算面内的网格是不变动的，这类问题处理起来也很便利。此时物理面内的网格变动反应在变换关系式中。

网格生成过程同样是在计算平面内进行的。把物理平面内一个单连通域 D 通过

正变换 T：
$$\begin{cases}\xi=\xi(x,y)\\ \eta=\eta(x,y)\end{cases} \tag{6-4-1}$$

或逆变换 T^{-1}：
$$\begin{cases}x=x(\xi,\eta)\\ y=y(\xi,\eta)\end{cases} \tag{6-4-2}$$

变到计算面上规则单连通域 D^*，变换的存在性一般可由黎曼存在定理保证。对于多连通物理域，还需引入人工边界——分支割线，把多连通域变成单连通域，如图 6-4-1 所示。

在计算面内网格是矩形的，生成物理面内的网格，是以 x,y 为因变量，ξ,η 为自变量，给出计算面内各边界上 $x(\xi,\eta)$、$y(\xi,\eta)$ 的分布，依不同的方法生成矩形域内的 $x(\xi,\eta)$、$y(\xi,\eta)$，即求的是逆变换式(6-4-2)。由于在一般情形，变换的解析表达式难以求出，通常只能采用数值方法进行，在求出变换 T^{-1} 后，从计算面(ξ,η)的等距网格线 $\xi=\text{const}$ 和 $\eta=\text{const}$，即可自动生成物理面(x,y)上的网格及节点，这就是数值网格生成。

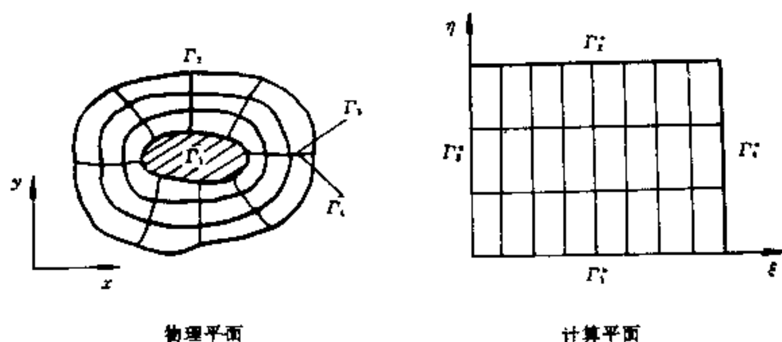


图 6-4-1 网格生成问题示意图

6.4.2 网格的一般分类

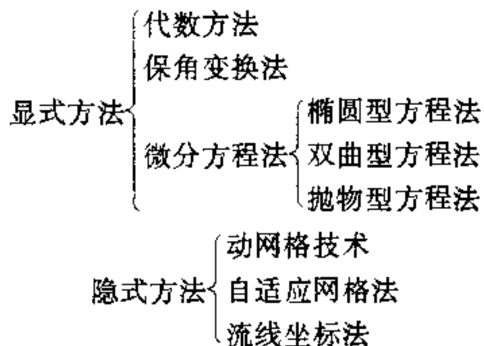
对当前基于贴体坐标系的网格生成技术，可以按其最终生成的网格的拓扑特性，也可以按生成网格的方法来进行归类。

从网格的拓扑特性看，可以分为规则与不规则两类网格。规则网格一般是四边形的，适合于差分运算，常见的有 H 型、O 型、C 型以及它们之间的组合形式；不规则网格包括诸如三角形、四面体、Voronoi 形[31]等形状，主要用于有限元计算，也可用于拉格朗日型的有限差分方法。几种典型的网格如图 6-4-2。

在有限差分法中，采用何种类型的网格，既取决于所考虑的流动问题的特性，也取决于边界的几何特性，常常还与所采用的差分算法有关。在给定边界形状，选定差分算法后，网格类型的选择往往直接影响着数值解的收敛性能。

按生成网格的方法来划分，可以分成显式方法与隐式方法两大类。应用显式方法生成网格，其网格生成过程与待求解的物理问题控制方程组的数值求解过程各自分别独立地进行；应用隐式方法生成网格，则网格生成过程与物理问题的模拟过程是耦合在一起的。对前者，物理问题的模拟是在已生成的网格上进行的；对后者，在计算过程中不断调整网格，最终的网格在计算完毕才能得到。当然，即便对显式方法，在生成网格的过程中也应该考虑所要模拟的物理问题的特性。

对显式、隐式网格生成方法，又可分别被分成以下一些类型：



目前大量采用的是显式方法，本节将对显式方法及动网格技术作简单介绍，自适应网格在下节介绍，流线坐标法可参见文献[31]，由于流线坐标法还未达到实用阶段，故本书不做介绍。

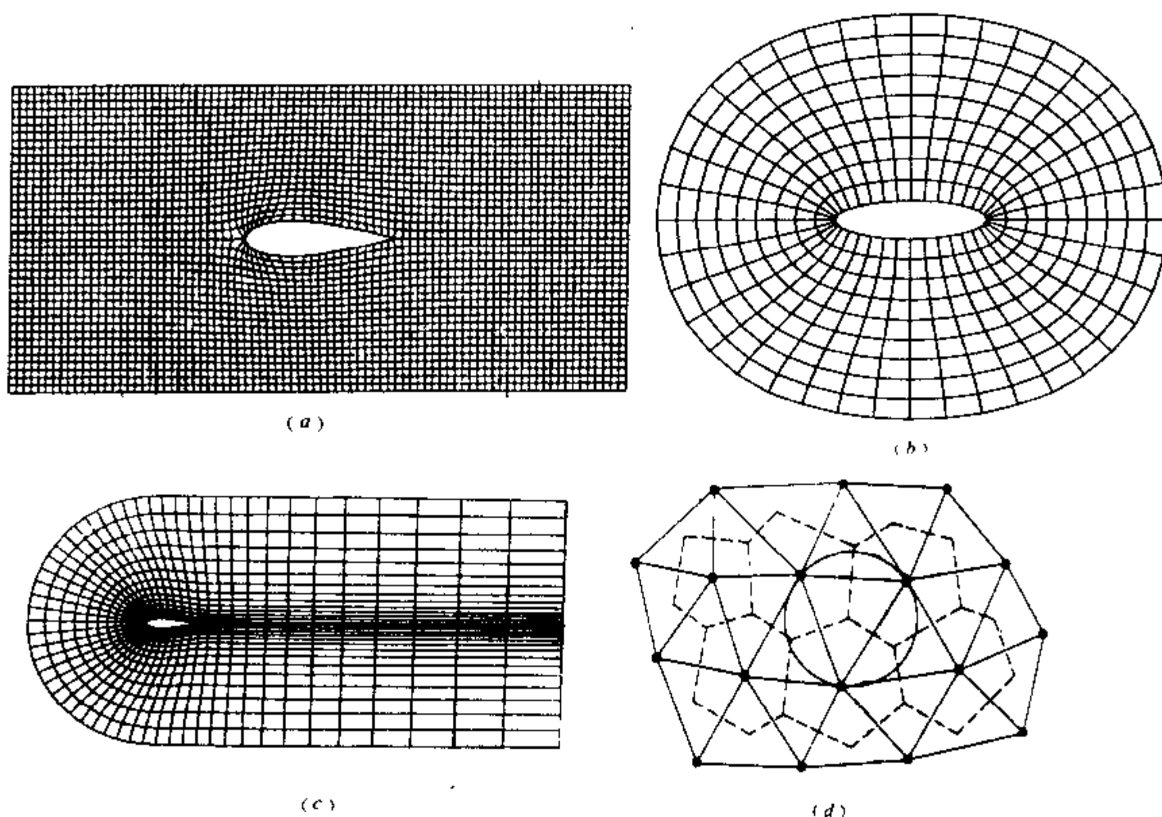


图 6-4-2 几种典型网格示意图

(a) H 型;(b) O 型;(c) C 型;(d) Voronoi 型

6.4.3 截断误差的初步分析

由于引入了曲线网格,在对偏导数进行有限差分运算时,其截断误差与笛卡尔坐标系下均匀网格时大不相同,有必要进行分析。

在曲线坐标系中,差分表达是先把笛卡尔坐标系下的偏导变换成曲线坐标系下的偏导(与变换关系式有关),曲线坐标系下的偏导可以在计算平面内的均匀直网格上进行差分表达。对笛卡尔坐标系下的均匀网格分布,截断误差随网格点空间间距的减小而减小。对于非均匀的网格点分布,情况远为复杂,此时局部网格点间距的减小可以通过两种方式得到:增加总体网格点数目,保持网格点分布形式不变;或者保持总体网格点数目不变,而改变网格点的分布形式。误差分析表明,对前一种情况,即网格点分布的相对形式不变时,截断误差与网格点数目的平方成反比,即网格点数目增加一倍时,截断误差为原来的四分之一,这时的截断误差分析具有整体的意义。对于后一种情况,保持网格点数目不而改变网格点分布形式时,由于某一局部网格点的增多,必然导致另一局部网格点的减少,这时其截断误差的分析具有局部的特征。

视生成网格方法的不同,变换关系可以以函数形式给出(如初等变换),也可以数值形式给出(如微分方程法,各种稳式方法);对变换矩阵中各量也可以准确地或数值地表达。截断误差的分析表明,对变换关系式中各偏导数(x_ξ、y_ξ、x_η、y_η)用与函数偏导同样的差分式来表达时,反而比用精确的分析表达式更为有利。对于一维情形

$$f_x = \frac{f_\xi}{x_\xi} \tag{6-4-3}$$

对 f_ξ 取中心差分，而 x_ξ 准确表达时($\Delta\xi=1$)，其截断误差为

$$T_1=-\frac{1}{6}\frac{x_{\xi\xi\xi}}{x_\xi}f_x-\frac{1}{2}x_{\xi\xi}f_{xx}-\frac{1}{6}(x_\xi)^2f_{xxx} \tag{6-4-4}$$

而对 f_ξ、x_ξ 均取中心差分时，截断误差为

$$T_2=-\frac{1}{2}x_{\xi\xi}f_{xx}-\frac{1}{6}(x_\xi)^2f_{xxx} \tag{6-4-5}$$

即 x_ξ的数值表达消除了对其准确表达时截断误差的第一项，与 f_x 本身有关的量。在 T_1、T_2 的表达式中的最后一项，对于均匀网格点分布同样存在，而 T_1 中的前两项及 T_2 的前一项，则是由于网格点的非均匀分布引起的。

由(6-4-4)式可以看出，要使差分格式保持二阶精度，需要 $x_{\xi\xi\xi}$与$(x_\xi)^3$ 同阶，$x_{\xi\xi}$与$(x_\xi)^2$ 同阶，而且对物理解变化剧烈的区域，即其本身偏导较大的区域，x_ξ 应相应较小，即网格点分布应较密集。

由(6-4-5)式可以看出，T_2 的第一项与函数的二阶导数成正比，代表着数值耗散，而其系数与网格点空间间距的变化率有关，所以该数值耗散项可能取负值而导致不稳定。出于这种考虑，网格点空间间距的变化不宜过大，否则将引入较大的误差。

对于二维情形，一阶偏导

$$f_x=(y_\eta f_\xi-y_\xi f_\eta)/J \tag{6-4-6}$$

其中 J 是变换的雅可比行列式

$$J=x_\xi y_\eta-x_\eta y_\xi \tag{6-4-7}$$

同上，对其中各偏导均取中心差分表示，可得其截断误差

$$\begin{aligned}T=&\frac{1}{2J}(y_\xi x_\eta x_{\eta\eta}-x_\xi y_\eta x_{\xi\xi})f_{xx}+\frac{1}{2J}y_\xi y_\eta(y_{\eta\eta}-y_{\xi\xi})f_{yy}\\&+\frac{1}{2J}[y_\xi y_\eta(x_{\eta\eta}-x_{\xi\xi})+x_\eta y_\xi y_{\eta\eta}-x_\xi y_\eta y_{\xi\xi}]f_{xy}\\&+\text{网格点间距的二阶量}\end{aligned} \tag{6-4-8}$$

同一维情形的分析一样，为了保持差分式的二阶精度，则(以下 $\boldsymbol{r}=(x,y)$)

$$\frac{x_{\xi\xi}}{|\boldsymbol{r}_\xi|^2},\quad\frac{y_{\xi\xi}}{|\boldsymbol{r}_\xi|^2},\quad\frac{x_{\eta\eta}}{|\boldsymbol{r}_\eta|^2},\quad\frac{x_{\eta\eta}}{|\boldsymbol{r}_\eta|^2}$$

应是有界的，且对雅可比行列式值趋于零的速度也应加以限制，如以 θ 为 ξ、η 坐标线的夹角，则应限定 ctgθ 有界，即$|\text{ctg}\theta|\leqslant M$，则 J 应满足

$$g=J^2\geqslant\frac{1}{M^2+1}|\boldsymbol{r}_\xi|^2\cdot|\boldsymbol{r}_\eta|^2 \tag{6-4-9}$$

若进一步对高阶导数进行分析，则可知要保持差分精度，还应使

$$\frac{x_{\xi\eta}}{|\boldsymbol{r}_\xi|\cdot|\boldsymbol{r}_\eta|},\quad\frac{y_{\xi\eta}}{|\boldsymbol{r}_\xi|\cdot|\boldsymbol{r}_\eta|}$$

有界。

(6-4-9)式表明，网格应尽量保持正交性。对此还可做以下的局部分析，在如图 6-4-3 所示的平行网格中，有

$$x_\eta=x_{\eta\eta}=x_{\xi\eta}=y_{\xi\xi}=y_{\xi\eta}=0$$

于是(6-4-8)式变成

$$T=-\frac{1}{2}x_{\xi\xi}f_{xx}+\frac{1}{2}\frac{y_{\xi}}{x_{\xi}}(y_{\eta\eta}f_{yy}-x_{\xi\xi}f_{xy})\qquad(6\text{-}4\text{-}10)$$

由于此时 $y_{\xi}/x_{\xi}=\mathrm{ctg}\theta$，上式为

$$T=-\frac{1}{2}x_{\xi\xi}f_{xx}+\frac{1}{2}(y_{\eta\eta}f_{yy}-x_{\xi\xi}f_{xy})\mathrm{ctg}\theta\quad(6\text{-}4\text{-}10')$$

式中第一项对正交网格也同样存在，而后而的项是由于网格的非正交性引起的。网格偏离正交性越大，则截断误差越大；在边界附近若采用一侧差分，非正交网格引起的误差将更为严重。

图 6-4-3 平行网格示意图

综上所述，初步的误差分析表明，为减小由于引入曲线网格引起的误差，应该：

(1) 使网格分布尽可能光滑；

(2) 使网格尽可能正交；

(3) 使网格点在物理解变化剧烈区相对密集。

在数值生成网格时，常常要考虑以上几点，即网格的光滑性、正交性及自适应性。

6.4.4 网格生成的代数方法

代数方法是生成网格的決速方法。其优点是简洁、方便、无需求解偏微分方程组。其缺点是对复杂区域还存在困难。

用代数方法生成网格，边界点上网格点分布可以根据需要选取，但一般难以保证网格的正交性；其生成网格的光滑度一般低于椭圆型微分方程生成的网格；在代数方法中可以控制网格的分布。代数方法可用来处理边界较简单且较光滑的情形，也可作为其它需用迭代法求解才能生成网格的方法的初始解。

一、初等变换方法

初等变换方法是利用初等函数（如指数函数、三角函数等）作为变换函数。例如指数函数可用来处理无穷远边界，还可用来控制网格的分布。以下的变换

$$\begin{cases}x=\xi\\ y=\dfrac{e^{k\eta}-1}{e^{k}-1}\end{cases}\qquad(6\text{-}4\text{-}11)$$

使网格向 $y=0$ 相对密集，如图 6-4-4 所示。其中 k 是可调参数，k 越大，密集度越高。若 $y=0$ 是物面，则可达到在物面附近网格线相对密集的目的，例如在处理边界层流动时。这种变换还可用于向多条坐标线集中或向某一点集中。

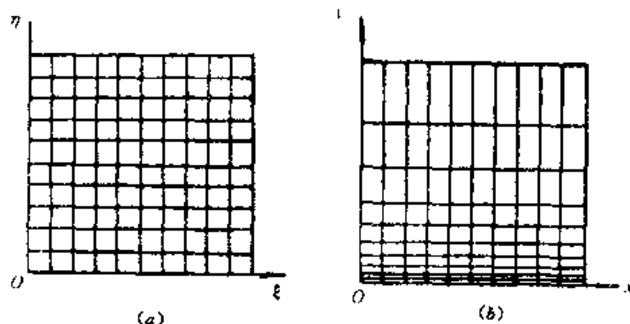


图 6-4-4 网格向 $y=0$ 的密集

(a)物理平面 (b)计算平面

二、剪切变换和 Hermite 变换

典型的剪切变换如图 6-4-5 所示，其变换关系式为

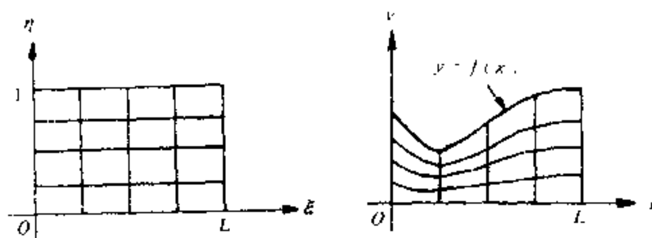


图 6-4-5 剪切变换

(a)物理平面 (b)计算平面

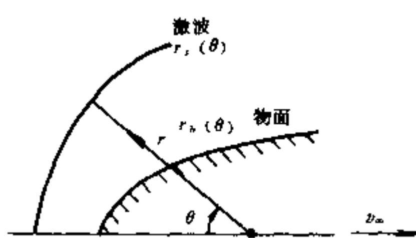


图 6-4-6 钝体高超音速绕流

$$\begin{cases} x=\xi \\ y=\eta f(\xi) \end{cases} \tag{6-4-12}$$

其中 $y=f(x)$ 是上边界。为得到一般的剪切变换表达式，把上式改写成矢量形式

$$(x,y) = (\xi,0) + \eta[(\xi,f(\xi)) - (\xi,0)] \tag{6-4-12'}$$

其中$(\xi,0)$与$(\xi,f(\xi))$分别是下边界与上边界。若一般地，下、上边界是任意的矢量函数$\boldsymbol{P}_1(\xi)$、$\boldsymbol{P}_2(\xi)$，$\boldsymbol{P}(\xi,\eta)$是笛卡尔系下的位置矢量，则一般的剪切变换可写成

$$\boldsymbol{P}(\xi,\eta) = \boldsymbol{P}_1(\xi) + \eta[\boldsymbol{P}_2(\xi) - \boldsymbol{P}_1(\xi)] \tag{6-4-13}$$

剪切变换的缺点是光滑性差，边界的不连续性传播到求解域内，改进方法之一是采用经典的埃尔米特插值，此时还需给出边界上的一阶导数，利用三次插值，埃尔米特变换可写成

$$\begin{aligned} \boldsymbol{P}(\xi,\eta) = &(1-3\eta^2+2\eta^3)\boldsymbol{P}(\xi,o) + \eta^2(3-2\eta)\boldsymbol{P}(\xi,1) + \\ &\eta(1-\eta)^2\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \eta}(\xi,o) + \eta^2(\eta-1)\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \eta}(\xi,1) \end{aligned} \tag{6-4-14}$$

利用埃尔米特变换可以生成在边界附近正交的网格。

剪切变换的一个典型应用是二维钝体高超音速绕流的求解[32]。图 6-4-6 所示是高超音速来流绕过一钝体时，头部激波层情况，求解域是 $0\leqslant\theta\leqslant\theta_{max}, r_b(\theta)\leqslant r\leqslant r_s(\theta)$，其中 $r_b(\theta)$、$r_s(\theta)$ 分别是物面与曲线激波方程。在采用激波装配法求解波后流场时，Moretti[32]引入如下剪切变换

$$\begin{cases} \xi = \dfrac{r-r_b(\theta)}{r_s(\theta)-r_b(\theta)} \\ \eta = \pi - \theta \end{cases} \tag{6-4-15}$$

把求解域变成矩形域。由于激波位置未知，需迭代求解，这里还涉及动网格问题。

三、多面方法[33]

对于计算网格的要求，不仅仅是网格的贴体性，还包括光滑度、形状、处理多连通域的能力以及对物理解的分辨率等，为进一步对网格进行控制，发展了多面变换(Multisurface Transformation)。其作法是，为了产生内边界 $\boldsymbol{A}(\xi)$到外边界 $\boldsymbol{B}(\xi)$所夹区域内的坐标，在两曲面之间引入多个中间曲面 $\boldsymbol{P}_k(\xi), k=1,2,\cdots,N$，其中 $\boldsymbol{P}_1(\xi)=\boldsymbol{A}(\xi), \boldsymbol{P}_N(\xi)=\boldsymbol{B}(\xi)$，以控制边界之间的坐标方向。

多面法要寻找一个矢量值函数

$$\boldsymbol{P}(\xi,\eta) = (x(\xi,\eta), y(\xi,\eta)) \tag{6-4-16}$$

使内边界 $\boldsymbol{A}(\xi)$对应于 $\eta=0$，外边界对应于 $\eta=1$，中间曲面 $\boldsymbol{P}_2,\cdots,\boldsymbol{P}_{N-1}$，一般不是 $\eta=$const 坐

标面，而用来控制穿过曲面的坐标轴线方向。对第 k 与第 $k+1$ 个曲面，作函数

$$\boldsymbol{V}_k(\xi) = E_k[\boldsymbol{P}_{k+1}(\xi) - \boldsymbol{P}_k(\xi)],k = 1,2,\cdots,N-1 \tag{6-4-17}$$

是横穿两曲面的一矢量，E_k 为待定常数，如图 6-4-7 所示。若要求 $\boldsymbol{P}(\xi,\eta)$ 沿 η 方向的切线平行于 $\boldsymbol{V}_k$，即

$$\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \eta}\Big|_{\eta=\eta_k} = \boldsymbol{V}_k(\xi),k = 1,2\cdots,N-1 \tag{6-4-18}$$

图 6-4-7　多面变换的构造

则可取

$$\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \eta} = \sum_{k=1}^{N-1}\phi_k(\eta)\boldsymbol{V}_k(\xi) \tag{6-4-19}$$

其中插值函数 $\phi_k(\eta)$ 满足

$$\phi_k(\eta_l) = \delta_{kl} = \begin{cases}1 & k = l \\ 0 & k \neq l\end{cases} \tag{6-4-20}$$

对(6-4-19)式积式，可得

$$\boldsymbol{P}(\xi,\eta) = \boldsymbol{P}_1(\xi) + \sum_{k=1}^{N-1}E_kG_k(\eta)[\boldsymbol{P}_{k+1}(\xi) - \boldsymbol{P}_k(\xi)] \tag{6-4-21}$$

其中 $G_k(\eta) = \int_0^\eta \phi_k(x)\mathrm{d}x$ (6-4-22)

常数 E_k 可这样选取：$\eta=\eta_{N-1}$ 时，最终位置应落在 $\boldsymbol{B}(\xi)$ 上，于是 $E_kG_k(\eta_{N-1})=1$，多面插值公式最终为

$$\boldsymbol{P}(\xi,\eta) = \boldsymbol{P}_1(\xi) + \sum_{k=1}^{N-1}\frac{G_k(\eta)}{G_k(\eta_{N-1})}[\boldsymbol{P}_{k+1}(\xi) - \boldsymbol{P}_k(\xi)] \tag{6-4-23}$$

中间面的给定及插值多项式 ϕ_k 的选取可用来控制网格的生成。

当 $N=2$，即无中间曲面时，插值函数为常数，(6-4-23)式就变为剪切变换(6-4-13)式；若有两个中间曲面，且插值多项式取点 $\eta_1=0,\eta_2=1/2,\eta_3=1$ 的整体四次多项式插值，则得到埃尔米特变换(6-4-14)式，当两个中间曲面控制被边界上的一阶导数代替时，得到精确的埃尔米特公式。

图 6-4-8 给出了一段直线与一段圆弧之间所生成的网格。

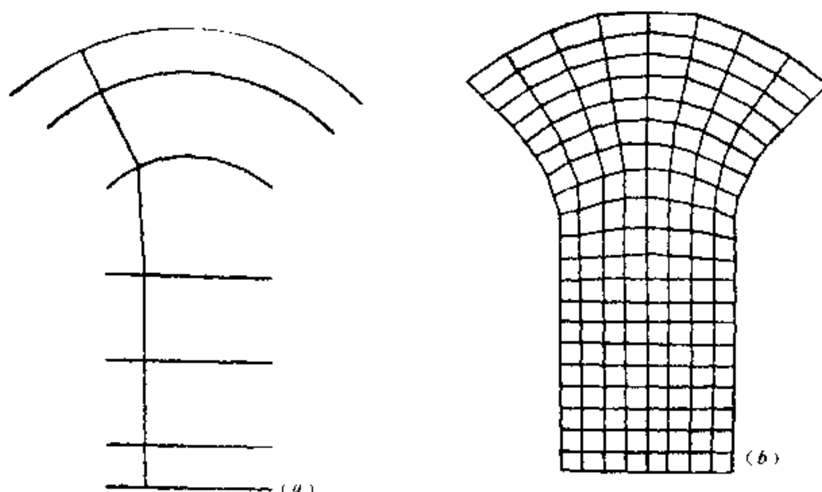


图 6-4-8　多面变换一实例
(a)物理平面　　(b)计算平面

四、布尔运算(Boolean Operations)和超限插值(Transfinite Interpolation)方法[34,35]

多面方法可以看成是在某个方向控制网格生成的方法，利用布尔运算可以做到在多个方向(二维时是两个方向)控制网格。

考虑如图 6-4-9 所示的四条曲线围成的平面域到 $\xi\eta$ 面上域$[0,1]\times[0,1]$的变换。记所有变换的集合为 $\boldsymbol{F}(\xi,\eta)$。为简便起见，以剪切变换为例。$\boldsymbol{F}$ 中包含剪切变换及其它各种变换，η 方向的剪切变换可写成

$$Q_\eta[\boldsymbol{F}] = (1-\eta)\boldsymbol{F}(\xi,0) + \eta\boldsymbol{F}(\xi,1) \tag{6-4-24}$$

ξ 方向的剪切变换可写成

$$Q_\xi[\boldsymbol{F}] = (1-\xi)\boldsymbol{F}(0,\eta) + \xi\boldsymbol{F}(1,\eta) \tag{6-4-25}$$

其中 $\boldsymbol{F}(\xi,o)$、$\boldsymbol{F}(\xi,1)$分别是下、上边界，$\boldsymbol{F}(0,\eta)$、$\boldsymbol{F}(1,\eta)$分别是左、右侧边界。另外可验证 $Q_\eta^2=Q_\eta$，$Q_\xi^2=Q_\xi$。两个方向上剪切变换之和满足边界约束，但角点处计算了两次，应该从中减去以下的所谓“张量积”插值

$$Q_\xi Q_\eta[\boldsymbol{F}] = Q_\eta Q_\xi[\boldsymbol{F}] = (1-\xi)(1-\eta)\boldsymbol{F}(0,0) + \xi(1-\eta)\boldsymbol{F}(1,0) + (1-\xi)\eta\boldsymbol{F}(0,1) + \xi\eta\boldsymbol{F}(1,1) \tag{6-4-26}$$

于是可得“布尔和”(Boolean Sum)算子

$$Q_\xi \oplus Q_\eta = Q_\xi + Q_\eta - Q_\xi Q_\eta \tag{6-4-27}$$

变换 $Q_\xi\oplus Q_\eta[\boldsymbol{F}]$满足要求。布尔和可写成以下形式：$Q_\xi+Q_\eta(1-Q_\xi)$，于是二维过程可分裂成以下两步

$$\boldsymbol{F}_1 = Q_\xi[\boldsymbol{F}] \tag{6-4-28.1}$$

$$\boldsymbol{F}_2 = \boldsymbol{F}_1 + Q_\eta[\boldsymbol{F} - \boldsymbol{F}_1] \tag{6-4-28.2}$$

因而可在两个方向控制网格的生成。

若在每个方向引入中间控制面，则得到超限插值方法。

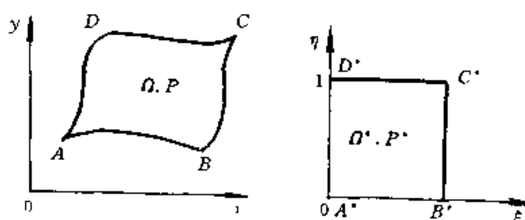


图 6-4-9 二维变换示意图
(a)物理平面 (b)计算平面

6.4.5 网格生成的保角变换方法

保角变换方法是利用保角变换来生成物理平面内的网格。保角变换法生成的网格不仅具有正交性，且各方向伸长率相等(拉梅系数相等)，方程最为简化；其网格有良好的光滑性；且网格在几何梯度较大的区域自动聚集，通常要引入某方向上的伸缩变换以控制网格的空间分布，这导致正交性的破坏。

一、解析方法

对一些特殊的求解域，存在解析函数变换到规则域。于是可以利用初等保角变换生成网格。

例如，初等变换

$$z = \mathrm{sh}\zeta, z = x + iy, \zeta = \xi + i\eta \tag{6-4-29}$$

把具有以下形式的管壁

$$y_w^2 - x_w^2\mathrm{tg}^2\eta_w = \sin^2\eta_w \tag{6-4-30}$$

的喷管内部变换到计算面内的矩形域，如图 6-4-10 所示。其等 ξ 线与等 η 线分别是一族椭圆和一族双曲线：

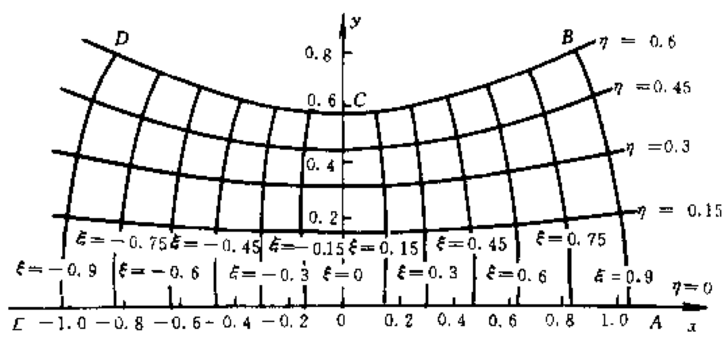


图 6-4-10 双曲型喷管的正交网格

$$\frac{x^2}{\mathrm{sh}^2\xi}+\frac{y^2}{\mathrm{ch}^2\xi}=1 \tag{6-4-31}$$

$$-\frac{x^2}{\cos^2\eta}+\frac{y^2}{\sin^2\eta}=1 \tag{6-4-32}$$

它们分别对应于不可压位流的等位线族和流线族，其交点形成了网格点。

二、数值方法

初等保角变换适用范围较窄，对于复杂形状，需寻找近似保角变换，要借助数值方法。其中基于 Schwarz-Christoffel（简称 $S\cdot C$）变换的数值方法应用最为广泛。

众所周知，Sohwarz-christoffel 变换把平面多边形域变到上半平面，对于任意形状曲线，可用有限条折线逼近，于是可利用 S-C 变换进行网格生成[36]。其网格生成是一个半解析半数值过程，变换形式已知，采取 S-C 变换的形式，其中的参数待定，需设计一个数值迭代过程确定其中参数。S-C 变换的一般形式是

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}\xi}=f(\xi)=M\prod_{i=1}^{n}(\xi-a_j)^{\alpha_i/\pi} \tag{6-4-33}$$

积分得

$$z=M\int_0^{\zeta}\prod_{i=1}^{n}(\zeta-a_i)^{\alpha_i/\pi}\mathrm{d}\zeta+N \tag{6-4-34}$$

其中 n 是角点数目，α_i 为角点的转折角，以顺时针方向为正（如图 6-4-11）；M、N 是复常数，a_i 是实数，它们是待定系数。除了要确定这些待定系数外，对(6-4-34)式的积分，在角点处有奇性需特别处理。R. T. Davis[36] 提供了一个详细的数值处理过程，并生成了外部流动的网格，而 J. M. Floryan[37] 则利用它生成了内部流动的贴体网格。图 6-4-12 给出了文献[36]中生成的一个网格实例。

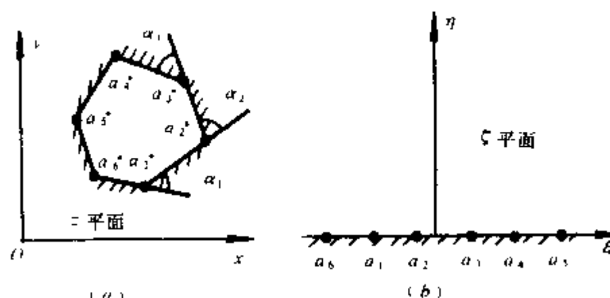


图 6-4-11 Schwarz-christoffel 变换示意图

6.4.6 网格生成的微分方程法

在网格生成方法中，微分方程法应用最为广泛，其中由 Thompson[38]等人在 1974 年提出的利用泊松方程生成网格的 T. T. M. 方法，是目前最成熟应用最广的方法，已可以处理复杂的三维求解域。

一、椭圆型方程法——T. T. M. 方法

6.4.1 节提出的网格生成问题是一个椭圆型边值问题，采用椭圆型微分方程是最自然、最合理的选择，文献[38]中选用泊松方程作为控制方程

$$\begin{cases}\nabla^2\xi = P\\ \nabla^2\eta = Q\end{cases} \tag{6-4-35}$$

其中 P、Q 是用来控制网格分布的强度因子。

选用泊松方程原因之一是对泊松方程研究较多，已有很多快速解法可资利用；另外，虽然泊松方程因为比拉普拉斯方程多了右端项而复杂一些，但正是 P、Q 的引入，使得可以调节网格的疏密度。

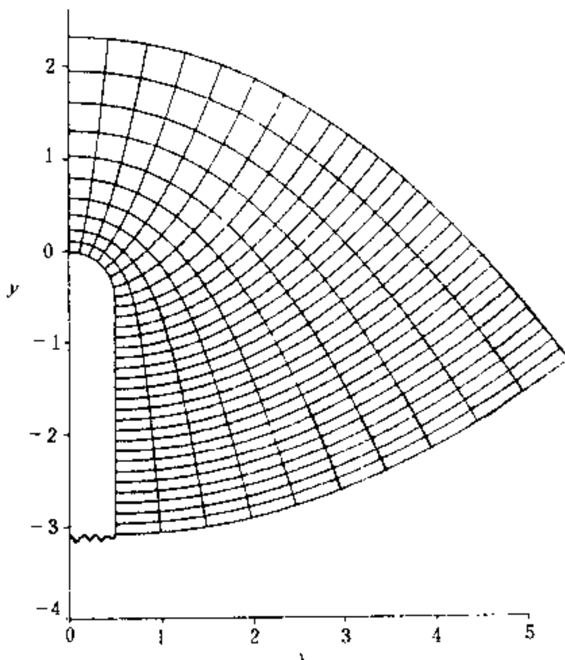


图 6-4-12 数值 Schwarz-christoffel 变换生成的网格

若希望等 η 线在 $\eta=\eta_i$ 附近集中，可取

$$Q = -a\cdot\mathrm{sgn}(\eta-\eta_i)e^{-c|\eta-\eta_i|} \tag{6-4-36}$$

其中 a、c 是用来调节疏密度的正常数，由数值实验来确定，一般情形下，$a=100\sim1000$，$c=0.5\sim1.5$。若要求等 η 线在某点(ξ_i,η_i)集中，则取

$$Q = -b\cdot\mathrm{sgn}(\eta-\eta_i)e^{-d[(\xi-\xi_i)^2+(\eta-\eta_i)^2]^{1/2}} \tag{6-4-37}$$

同样 b、d 是可调常数。一般地，P、Q 可取成

$$P = -\sum_{i=1}^{N_\xi}a_i\cdot\mathrm{sgn}(\xi-\xi_i)e^{-c_i|\xi-\xi_i|} - \sum_{j=1}^{M_\xi}b_j\cdot\mathrm{sgn}(\xi-\xi_j)e^{-d_j[(\xi-\xi_j)^2+(\eta-\eta_j)^2]^{1/2}} \tag{6-4-38.1}$$

$$Q = -\sum_{i=1}^{N_\eta}a_i\cdot\mathrm{sgn}(\eta-\eta_i)e^{-c_i|\eta-\eta_i|} - \sum_{j=1}^{M_\eta}b_j\cdot\mathrm{sgn}(\eta-\eta_j)e^{-d_j[(\xi-\xi_j)^2+(\eta-\eta_j)^2]^{1/2}} \tag{6-4-38.2}$$

由于物理平面上网格未知，在物理面内求解(6-4-35)式很不方便，而计算域上求解域是规则的，所以通常在计算域内求解反变换方程

$$\alpha\boldsymbol{r}_{\xi\xi} - 2\beta\boldsymbol{r}_{\xi\eta} + \gamma\boldsymbol{r}_{\eta\eta} + J^2(P\boldsymbol{r}_\xi + Q\boldsymbol{r}_\eta) = 0 \qquad 6\text{-}4\text{-}39.1)$$

其中 $\boldsymbol{r}=(x,y)$

$$\alpha = x_\eta^2 + y_\eta^2 \tag{6-4-39.2}$$

$$\beta = x_\xi y_\eta + y_\xi x_\eta \tag{6-4-39.3}$$

$$\gamma = x_\xi^2 + y_\xi^2 \tag{6-4-39.4}$$

$$J = \frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)} = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi \tag{6-4-39.5}$$

并在计算域边界上给出边值条件。这是一个非线性椭圆型边值问题，可用通常的有限差分法进行离散，一般采用中心差分，得到非线性代数方程组，可用通常的高斯—赛得尔迭代或超松弛迭代(SOR)法求解，就可完成网格的生成。

由于椭圆型方程的特性，T. T. M. 方法生成的网格具有良好的光滑性；T. T. M. 方法可以用强度因子控制网格，以适应物理问题的需要；若取消强度因子，则可得正交网格，强度因子的引入破坏了正交性，但其生成的网格一般仍是近于正交的。因此，T. T. M. 方法与其它方法相

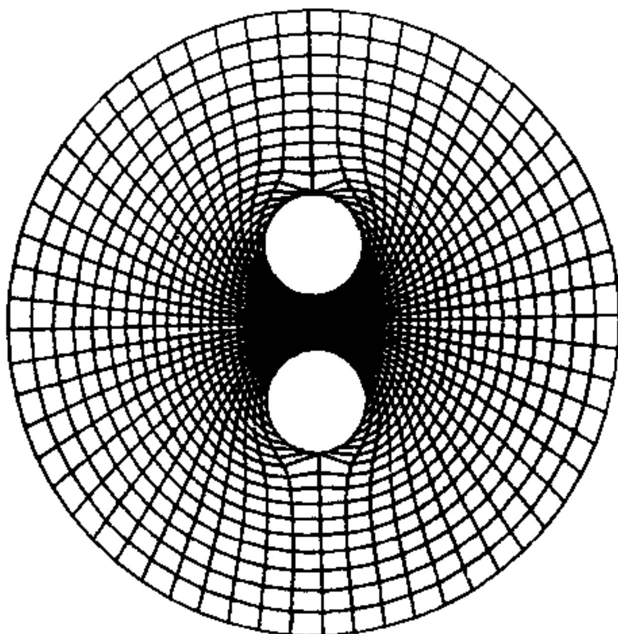


图 6-4-13　T. T. M. 法生成的网格

比具有有很大的优越性，已被广泛用于多种情形。图 6-4-13 给出了 T. T. M. 方法生成的高质量网格。

在 T. T. M. 方法中，用来控制网格的疏密度与聚集度的强度因子 P、Q 的选取，主要是基于对物理解的基本了解，强度因子中各参数大小也是由数值实验给出的。虽然边界上点的分布可以依边界曲率的变化自动调节，但边界点上的这种分布未必能保证在整个求解域中建立同样的分布。在 T. T. M. 方法中，如何做到网格的自动控制，网格分布与物理解的耦合有待进一步研究。

二、双曲型、抛物型方程[39,40]

除了用椭圆型方程生成网格外，也可以用双曲型或抛物型方程生成网格。考虑到双曲型与抛物型方程的特点，此时不能在整个边界上给定网格点的分布。

抛物型方程可以用来生成有两个给定边界的双连通域内的网格，双曲型方程则只允许一

个边界给定。所以只能用来生成无界域的网格，而且此时计算域的远边界的准确位置对于物理问题的求解应该不太重要，因而其应用范围不及椭圆型方程。

双曲型系统可以用来生成正交网格。对于二维情形，利用正交条件并令 J 为坐标线的给定函数($\Delta\xi=\Delta\eta=1$ 时是网格的微面积)，则

$$x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta = 0 \tag{6-4-40.1}$$

$$x_\xi x_\eta - y_\eta y_\xi = f(\xi,\eta) \tag{6-4-40.2}$$

其中 f 是 ξ,η 的给定函数，用来控制网格的分布。这是一个双曲型方程组，实际上，通过演算，可得

$$(x_\eta^2 + y_\eta^2)x_{\xi\xi} - (x_\xi^2 + y_\xi^2)x_{\eta\eta} = f_\xi y_\eta + f_\eta y_\xi \tag{6-4-41.1}$$

$$-(x_\eta^2 + y_\eta^2)y_{\xi\xi} + (x_\xi^2 + y_\xi^2)y_{\eta\eta} = f_\xi x_\eta + f_\eta x_\xi \tag{6-4-41.2}$$

若在 ξ 方向给定初值，则可沿 η 方向推进求解(6-4-40.1)式与(6-4-40.2)式。[39]

如前所述，双曲型方程在网格生成中的应用不象椭圆型方程广泛，因为整个边界上的网格点分布不能全部给定。边界上的不连续性将传播到求解域中，此时度量张量中的元素也存在不连续性，所以网格的光滑性较差。而且由于双曲型偏微分方程组存在着象激波那样的间断解，对于给定的边界上网格点的分布以及控制函数 $f(\xi,\eta)$ 可能得到不合适的网格。

若把椭圆型方程生成系统中的一个坐标方向的二阶偏导略去，则得到抛物型生成系统。其坐标线的分布可由类似于椭圆型方程生成方法中的控制函数来控制。

6.4.7 动网格技术

把复杂几何边界的物理问题变换到具有平行直线正交网格的计算平面内求解的作法，可以用来处理整个求解域随时间变化的非定常问题。此时，物理平面内的求解域(包括几何边界)及网格都随时间改变。若在物理面内求解，则必须在一个或若干个时间步后按新的几何边界重新给求解域构筑网格。且计算时用的控制方程应考虑到求解域及网格边界的变化，宜采用积分形式的守恒律方程。如积分形式质量守恒方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \rho \mathrm{d}V + \int_S \rho(\boldsymbol{U} - \boldsymbol{W}_s)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = 0 \tag{6-4-42}$$

式中 V 为求解域体积，S 为其周界，$\boldsymbol{U}$ 是流动速度，$\boldsymbol{W}_s$ 为求解域边界的移动速度。若将求解域划分为 I 个互相邻接网格，每网格体积为 V_i，每网格有 J 个表面，网格表面以 S_{ij} 记，则对每个网格

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{V_i} \rho \mathrm{d}V + \sum_{j=1}^{J}\int_{S_{ij}} \rho(\boldsymbol{U} - \boldsymbol{W}_s)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = 0 \tag{6-4-43}$$

网格边界移动引起网格体积改变，对整个求解域为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \mathrm{d}V = \int_S \boldsymbol{W}_s \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{6-4-44}$$

对网可格 i 为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{V_i} \mathrm{d}V = \sum_{j=1}^{J}\int_{S_{ij}} \boldsymbol{W}_s \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{6-4-45}$$

该式称为积分形式的几何守恒律。

物理面上网格随时间变动，计算面上网格则不是变的。物理面上网格的变动反映在变换关系式里，变换关系为

$$\begin{cases} \xi = \xi(x,y,t) \\ \eta = \eta(x,y,t) \\ \tau = t \end{cases} \tag{6-4-46}$$

计算面内求解域及网格边界为

$$S_t(\xi,\eta) = 0, \quad S_{c_i}(\xi,\eta) = 0 \tag{6-4-47}$$

物理面内求解域及网格边界为

$$S(x,y,t) = 0, \quad S_i(x,y,t) = 0 \tag{6-4-48}$$

变换的雅可比为 $J = x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta$。计算面内微分形式的质量守恒方程为

$$J\rho_t + \nabla \cdot (J\rho U) = 0 \tag{6-4-49}$$

用该方程组求解时，需计算 J 值，它可由积分形式几何守恒律(6-4-45)式求出。设边界 S_i 上任意点移动速度为

$$\boldsymbol{W}_{S_i} = (x_\tau, y_\tau)_{S_i} \tag{6-4-50}$$

则由斯托克斯定理及计算域内边界与时间无关，从而对时间微分与积分可交换得

$$J_t = J\nabla \cdot \boldsymbol{W}_{S_i} \tag{6-4-51}$$

而右端为

$$\begin{aligned} J\nabla \cdot \boldsymbol{W}_{S_i} &= J[(x_\tau)_x + (y_\tau)_y] \\ &= J[(x_\tau)_\xi \xi_x + (x_\tau)_\eta \eta_x + (y_\tau)_\xi \xi y + (y_\tau)_\eta \eta_y] \\ &= J[\nabla\xi \cdot (\boldsymbol{W}_{s_i})_\xi + \nabla\eta \cdot (\boldsymbol{W}_{s_i})_\eta] \\ &= [J\nabla\xi \cdot (\boldsymbol{W}_{s_i})]_\xi + [J\nabla\eta \cdot (\boldsymbol{W}_{s_i})]_\eta - \boldsymbol{W}_{s_i} \cdot [(J\nabla\xi)_\xi + (J\nabla\eta)_\eta] \end{aligned} \tag{6-4-52}$$

由 $\xi_\tau = \eta_\tau = 0$ 可得

$$\xi_t = -\nabla\xi \cdot \boldsymbol{W}_{s_i}, \quad \eta_t = -\nabla\eta \cdot \boldsymbol{W}_{s_i}$$

而由于 $J\nabla\xi = (y_\eta, -x_\eta)$，$J\nabla\eta = (-y_\eta, x_\xi)$，容易验证(6-4-52)式中最后一项为零。于是，若令

$$\hat{\xi}_P = J\xi_P, \hat{\eta}_P = J\eta_P, P = t,x,y \tag{6-4-53}$$

则(6-4-52)式为

$$J[\nabla \cdot \boldsymbol{W}_n] = -[(\hat{\xi}_t)_\xi + (\hat{\eta}_t)_\eta] \tag{6-4-54}$$

几何守恒律(6-4-45)式的微分形式为

$$J_t + (\hat{\xi}_t)_\xi + (\hat{\eta}_t)_\eta = 0 \tag{6-4-55}$$

用动网格技术求解时，需联立(6-4-49)式与(6-4-55)式求解。

求解时从物理面内求解域的初始状态出发，作出计算面内网格，给出初始的坐标变换量

$$x_\xi^0, \quad y_\xi^0, \quad x_\eta^0, \quad y_\eta^0$$

进而求出 J^0。若已知物理面内求解域的运动规律，$\boldsymbol{W}_s = (x_\tau^n, y_\tau^n)$，$n$ 指时间步，以及物理面内求解域边界 $(x^0, y^0)_S$，则可用前述的各种方法构筑网格，从而确定各网格点位置 $(x^0, y^0)_{S_i}$，及坐标变换量 $(x_\xi^0, y_\xi^0, x_\eta^0, y_\eta^0)_{S_i}$，并由求解域边界运动规律算出 $\triangle\tau$ 时间后新的求解域边界点位置 $(x^1, y^1)_s$

$$x^1 = x^0 + x_\tau^0 \triangle\tau$$

$$y^1 = y^0 + y_\tau^0 \triangle\tau$$

于是又可构筑新的网格。即对每个时间步可由上述方法算出坐标变换量$(x_\xi^n, y_\xi^n, x_\eta^n, y_\eta^n)_{S_i}$，进而算出以下量

$$\dot{\xi}_x^n = J\xi_x^n = y_\eta^n, \dot{\xi}_y^n = J\xi_y^n = -x_\eta^n$$

$$\dot{\eta}_x^n = J\eta_x^n = -y_\xi^n, \dot{\eta}_y^n = J\eta_y^n = x_\xi^n$$

$$\dot{\xi}_t^n = -J\nabla\xi \cdot \mathbf{W}_{s_i} = -(\dot{\xi}_x^n x_\tau^n + \dot{\xi}_y^n y_\tau^n)$$

$$\dot{\eta}_t^n = -J\nabla\eta \cdot \mathbf{W}_{s_i} = -(\dot{\eta}_x^n x_\tau^n + \dot{\eta}_y^n y_\tau^n)$$

这样就可由(6-4-55)式算出J^n为

$$J^n = J^{n-1} + \triangle J^n$$

$$\triangle J^n = -\triangle\tau[(\dot{\xi}_t^n)_\xi - (\eta_t^n)_\eta]$$

在求出J^n后，即可在计算面内求解形如(6-4-49)式的流体动力学方程组。

§6.5 自适应网格(Adaptive Grid)

在流体力学计算中，往往遇到流动在某些未知区域内变化较剧烈的情形，例如运动着的激波面、接触间断面、滑移面等等，在处理这些快速变化区时，为提高精度和分辨率，需采用较细的网格。若不加处理地划分网格，可能导致分辨率较低或计算效率低下。根据这种考虑，计算网格应在迭代过程中不断调节，以做到网格点分布与物理解的耦合，即采用自适应网格技术。自适应网格希望做到在物理解变动较大的区域网格自动密集，而在物理解变化平缓区域网格相对稀疏，即希望在保持计算的高效率的同时得到高精度的解。对自适应网格的另外要求是保证网格足够的光滑性，且网格点的变动应较缓慢，以防出现数值振荡。

自适应网格技术是期望合理地安排网格。可以分成两类：一类是局部加密法[41]，在解的快速变化区增加新网格点，有时还删除一些不必要的网格点以控制网格点数目不致太多，这类方法一般处理定常问题较为有效，对诸如具有运动激波这类的非定常问题较为麻烦，这里不做介绍；另一类是整体方法，保持网格点数目不变，通过网格点的运动重新排布网格。这是目前大量采用的方法，综述性的文献可参见[30]。自适应网格技术是近些年来研究的热点，发展了多种方法，本节仅做简单介绍。

前面已经简单叙述了网格生成方法，这是采用贴体坐标系进行数值计算的前提条件。在初始网格生成以后，为了提高数值计算精度和分辨率、改善其收敛性能而采用自适应技术，是在计算过程中重新排布网格的过程。概括地说，可以根据所需求解的问题的物理特性和几何特性，选用以上描述的某种显式方法生成初始计算网格，自适应过程是使网格重新分布，这可通过使某个量取极小值达到，因而一般可用变分原理来处理。由变分原理得出的欧拉—拉格朗日方程组作为调整网格的控制方程组。

一般是使以下的积分

$$I = \iint_{D^*} wQ\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta \tag{6-5-1}$$

或

$$I = \iint_{D} wQ\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{6-5-2}$$

取极小值。两式分别指在计算面(ξ,η)和物理面(x,y)上积分。其中w是权函数，Q是描述网格特性的某个量。通过w与Q的选取达到控制网格、使网格合理分布的目的。

权函数 $w>0$，通常是数值解误差的某种量度，或是解在空间变化的某种量度。某局部权函数越大时，其网格点间距越小，从而使得网格在误差较大的区域或物理解空间变化较大的区域分布密集，而在小误差区域或光滑区域分布稀疏。一般地，w 依赖于物理解的梯度。如 u 是物理解，则 w 可取成

$$w = [1 + (\alpha|\nabla u|^2]^{1/2} \tag{6-5-3}$$

可以看出，其中因子“1”倾向于生成等间距网格；$(\alpha|\nabla u|)^2$ 倾向于在大梯度域聚集、在平缓区网格间距无穷大。以上给出的 w 是两者的平均效应。α 是可调参数，α 越大，在大梯度域的聚集度越高。

对一维情形，解曲线的微弧长为

$$\mathrm{d}s = [\mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}u^2]^{1/2} = \sqrt{1 + u_x^2}\mathrm{d}x \tag{6-5-4}$$

因此在 $\alpha=1$ 时，(6-5-3)式可写成

$$w = s_x \tag{6-5-3'}$$

如此选取的 w 导致如图 6-5-1 的网格分布。

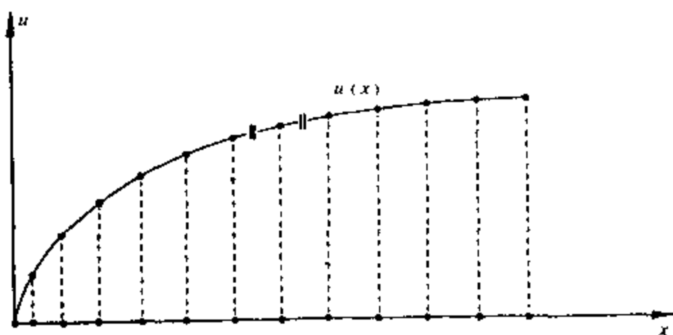


图 6-5-1 大梯度域网格的聚集

以上选取的 w 不能导致网格在极值域附近聚集，因此可在其中加入二阶导数 u_{xx} 或曲率

$$k = \frac{u_{xx}}{(1 + u_x^2)^{3/2}} \tag{6-5-5}$$

的影响，例如取

$$w = (1 + \beta^2|k|)\sqrt{1 + \alpha^2 u_x^2} \tag{6-5-6}$$

或

$$w=1+\alpha|u_x|+\beta|u_{xx}| \tag{6-5-6'}$$

其中 α,β 是可调参数，α 强调在高梯度域聚集，β 强调大曲率域聚集。

网格量 Q 的选取是网格控制的另一方面。如前所述，对于计算网格，除贴体性要求外，自适应性、光滑性、正交性都很重要，Q 的选取应适应这些要求。这三方面的要求在网格中应该得到体现，简单地说，对于网格的控制，就是希望在自适应性、光滑性、正交性三方面达到一种最佳的效果，取得一种平衡效应，文献[42]提出的方法就是网格三个特性的一种平衡。

首先，变换的雅可比行列式值 J 是物理面内网格面积与计算面内网格面积之比（三维时为体积比），因此 J 值大小反映了网格的疏密程度。于是取 $Q=J$ 时，使

$$I_a = \iint_D wJ\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{6-5-7}$$

取极小值，就可使网格在大梯度区密集，从而满足自适应性。

其次，网格偏离正交性的程度可以用量$\nabla\xi\cdot\nabla\eta$来表示，$\nabla\xi\cdot\nabla\eta$越小，其正交性越好，$\nabla\xi\cdot\nabla\eta=0$的网格是正交的。因此取$Q=(\nabla\xi\cdot\nabla\eta)^2$，使

$$I_o=\iint_D(\nabla\xi\cdot\nabla\eta)^2J^3\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{6-5-8}$$

取极小值即可得到整体上正交性较好的网格。其中J^3相当于权函数。

最后，由于最光滑的网格是由拉普拉斯方程生成的，所以可以用量$[(\nabla\xi)^2+(\nabla\eta)^2]$来表示网格的光滑度，该值越小则网格越光滑。若取$Q=[(\nabla\xi)^2+(\nabla\eta)^2]$，使积分

$$I_s=\iint_D[(\nabla\xi)^2+(\nabla\eta)^2]\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{6-5-9}$$

取极小值，则得到总体光滑度最好的网格。

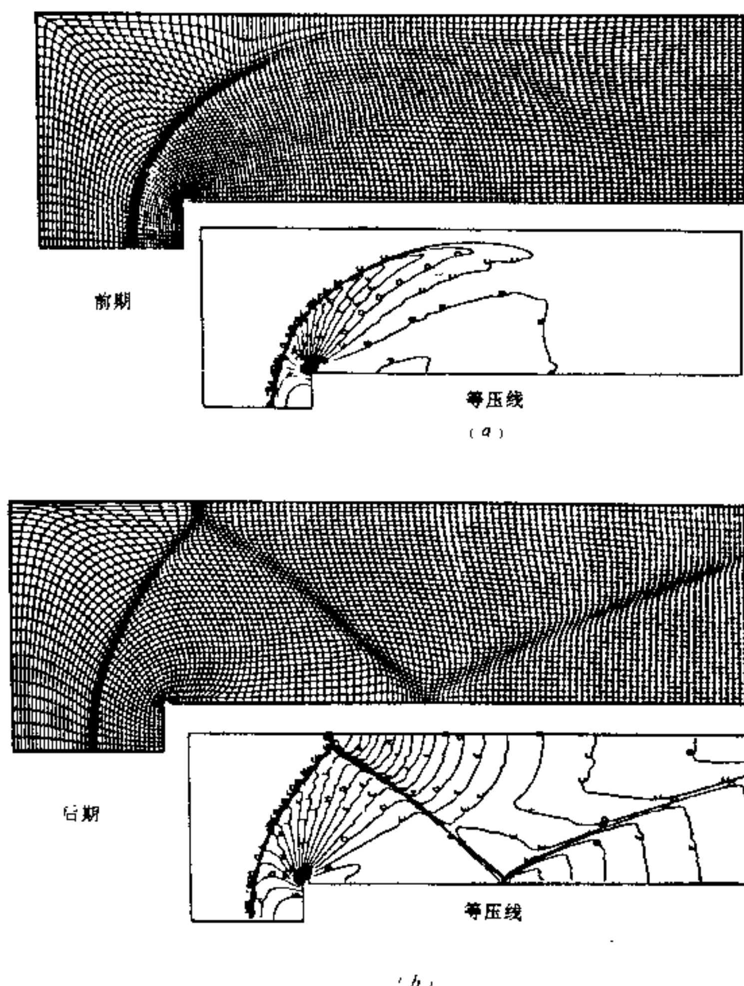


图 6-5-2 自适应网格一例

如上所述，网格的三方面要求应得到兼顾，所以综合以上三个因素，应使以下的泛函

$$I=\lambda_aI_a+\lambda_oI_o+\lambda_sI_s \tag{6-5-10}$$

取极小，其中λ_a，λ_o，λ_s是可调常数，分别强调自适应性、正交性和光滑性。$\lambda_o=\lambda_s=0$时，可以得

到最光滑的网格，但正交性和自适应性受到损失；类似地，$\lambda_a=\lambda_s=0$ 时，可以得到最正交的网格；而 $\lambda_o=\lambda_s=0$ 时，可以得到自适应性最好的网格。在实际计算中，要适当选取 λ_a、λ_o、λ_s 的值，以达到最佳的效果。

在选定 w、Q 之后，可得到欲使之取极小值的泛函的表达形式，在物理面内其一般形式为

$$I=\iint_D F(x,y,\xi,\eta,\xi_x,\xi_y,\eta_x,\eta_y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{6-5-11}$$

再由一般的变分原理得出其对应的欧拉—拉格朗日方程组

$$\nabla\cdot\frac{\partial F}{\partial(\nabla\xi)}-\frac{\partial F}{\partial\xi}=0 \tag{6-5-12.1}$$

$$\nabla\cdot\frac{\partial F}{\partial(\nabla\eta)}-\frac{\partial F}{\partial\eta}=0 \tag{6-5-12.2}$$

其中▽是哈密顿算子。由于计算是在计算平面内进行，该方程组还应变换到计算平面上来。该方程组构成了调整网格的方程组。对于(6-5-10)式给出的泛函，经过一系列运算可以得出其调整网格的方程组，详细表达式可见文献[42]。

在实际计算中，物理问题的求解一般应与网格的调整过程相间地进行。

使用自适应网格，一般能够改善数值解的收敛性能，减少离散点数目，提高激波分辨率。虽然网格点在物理面上随迭代进行而改变，但由于计算面上网格点的分布不变，数值计算在计算面内进行，所以无需插值，物理面上网格点的变化由网格的移动速度带进方程中。

图 6-5-2 给出了文献[42]中的一个结果，是可压缩理想流体在有一个小台阶的管道内流动的情形，可以看出激波的形成和反射，其中采用了自适应网格，压力梯度作为权函数。可以清楚地看出网格在激波所在区域的密集。

自适应网格方法处在不断发展之中。在目前的阶段，几乎所有的自适应方法都需要确定一些加权常数，其选择往往与待求解的问题的物理特性和几何特性有关，因而只能由数值实验来确定。如何减少这些参数的数目或如何做到这些参数的自动选取，是有待研究的领域。

参 考 资 料

〔1〕P. D. Lax, Weak solution of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation, Comm. Pure Appl. Math., Vol. 7, P. 159—193, 1954.

〔2〕G. Moretti, Computation of flows with shocks, Annual Review of Fluid Mechanics, VoL. 19, P. 313—337, 1987

〔3〕J. P. Boris and D. L. Book Flux-corrected transport. Ⅰ. SHASTA, a transport algorithm that works, J. Comp Phys., 11(1973), 38.

〔4〕D. L. Book, J. P. Boris, and K. Hain, Flux-ccorrected transport. Ⅱ. Generalization of the method, J. Comp. Phys. 18(1975), 248.

〔5〕J. P. Boris and D. L. Book, Flux-corrected transport. Ⅲ. Minimal-error FCT algorithms, J. Comp. Phys. 20(1976), 397.

〔6〕A. Harten, High resolution schemes for hyperbolic conservation laws, J. comp. Phys., 49(1983), 357.

〔7〕Dušan Odstrčil, A new optimized FCT algorithm for shock wave problems, J. Comp.

phys, 91(1990),71.

〔8〕C. W. Hirt, Heuristic stability theory for finite-difference equations, J. Comp, Phys., 2 (1968), 339.

〔9〕H. C. Yee, R. F. Warming and A. Harten, Implicit total variation diminishing schemes for steady-state calculations, J. Comp Phys., 57(1985), 327.

〔10〕P. K. Sweby, High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation Laws, SIAM J. Numer. Anal., 21(1984), 995.

〔11〕R. F. Warming and R. M. Beam, Upwind second order difference schemes and application in aerodynamics, AIAA J. 14(1976), 1241.

〔12〕B. Van Leer, Towards the ultimate conservative difference scheme, Ⅱ. Monotonicity and conservation combined in a second order scheme, J. Comp Phys., 14(1974), 361.

〔13〕P. L. Roe, Numerical algorithms for the Linear wave eguation, RAETR 81047, 1981.

〔14〕P. L. Roe, Some contributions to the modelling of discontinuous flows, Proc. AMS/SIAM Seminar, San Diego, 1983.

〔15〕S. K. Godunov, Mat. sb., 47(1959), 271 [in Russian];also;Cornell Aeronautical Lab. Transl.

〔16〕B. Van Leer, Towards the ultimate conservative difference scheme, III. upstram-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow, J. Comp. Phys., 23(1977), 263.

〔17〕B. Van Leer, Towards the ultimate conservative difference scheme IV A new approach to numerical convection, J Comp. Phys., 23(1977), 276.

〔18〕B. Van Leer, Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second-order sequel to Godunov's Method, J. Comp. Phys., 32(1979), 101.

〔19〕P. Colella and P. Woodward, The Piecewise Parabolic Method(PPM) for gas-dynamical simulations, J. Comp. Phys, 54(1984), 174.

〔20〕P. Colella. and H. M. Glaz Efficieut solution algorithms for the Riemann Problem for real gases, J. Comp. Phys., 59 (1985), 264.

〔21〕J. K. Dukowicz, A general, non-iterative Riemann solver for Godunov's method, J. Comp. Phys, 61 (1985), 119.

〔22〕P. Woodward and, P. Colella, The numerical Simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks, J. Comp. Phys., 54 (1984), 115.

〔23〕P. Colella, SIAM. J. Sci. statist Comput., 3(1982), 76

〔24〕M. L. Wilkins, Use of artificial viscosity in mutidimensional fluid dynamic calculations, J. Comp. Phys., 36 (1980) 281.

〔25〕S. P. Marsh, "LASL Shock Hugoniot data", Univ. of California Press, Berkeley/Los Angeles, 1980.

〔26〕M. S. Hall, A comparison of first and second order rezoned and Lagrangian Godunov solutions, J. Comp Phys, 90 (1990), 458.

〔27〕P. Colella, A direct Eulerian MUSCL scheme for gas dynamics, SIAM J. Sci Statist.

Comput., 6 (1985), 104.

〔28〕J. F. Thompson Numerical grid generation, Ed. by J. F. Thompson, North-Holland, 1982.

〔29〕P. R. Eiseman, Grid generation for fluid mechanics computations, Ann. Rev. Fluid Mech., 17 (1985), 487.

〔30〕D. F. Hawken, J. J. Gottlieb, and J. S. Hansen, Review of some adaptive node-movement techniques in finite-element and finite-difference solutions of partial differential equations J. Comp. Phys., 95 (1991), 254.

〔31〕涂侯杰,流线坐标系下跨音速流动计算研究及喷管流动的数值模拟,北京航空航天大学博士论文,1991.

〔32〕G. Moretti and M. Abbett, A time-dependent computational method for blunt body flows, AIAA J. 4 (1966), 2136.

〔33〕P. R. Eiseman, A multi-surface method of coordinate generation, J. Comp. Phys., 33 (1979), 118.

〔34〕W. J. Gordon, and C. A. Hall, Construction of curvilinear coordinate systems and application to mesh generation, Int. J. Numer. Meth. Eng, 7 (1973), 461.

〔35〕W. J. Gordan, and L. C. Thiel, Transfinite mappings and their application to grid generation, in 〔28〕)., P. 171.

〔36〕R. T. Davis, Numerical methods for coordinate generation based on Schwarz-Christoffel tranformations, AIAA Paper 79—1463, (1979).

〔37〕J. M. Floryan Conformal-Mapping-based coordinate generation method for channel flows, J. Comp. Phys., 58 (1985), 229.

〔38〕J. F. Thompson, F. C. Thomas, and C. W. Martin Automatic numerical generation of body fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary 2-D bodies, J. Comp. Phys., 15 (1974), 299.

〔39〕W. E. Nicolet, etal, Flowfield predictions about lifting entry vehicles, AIAA Paper 82—0026(1982).

〔40〕S. Nakamura, Marching grid generation using parabolic partial differential equations, in [28]. (1982).

〔41〕H. Dwyer, M. D. Smooke and R. J. Kee, Adaptive gridding for finite difference solution to heat and mass transfer problems in [28], (1982), P. 339.

〔42〕J. Saltzman and J. u. Brackbill, Application and generizations of variational methods for generating adaptive meshes, in [28], (1982) P. 865